

原子和亚原子物理学

高政祥 编著

北京大学出版社

责任编辑：顾卫宇
封面设计：常燕生

ISBN 7-301-05229-4

9 787301 052297 >

ISBN 7-301-05229-4/O·0513
定价：17.00 元

原子和亚原子物理学

高政祥　编著

北京大学出版社
北　　京

图书在版编目(CIP)数据

原子和亚原子物理学/高政祥编著. —北京:北京大学出版社,2001.9

ISBN 7-301-05229-4

Ⅰ.原… Ⅱ.高… Ⅲ.原子物理学-高等学校-教材 Ⅳ.056

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 064313 号

书　　名:原子和亚原子物理学
著作责任者:高政祥　编著
责 任 编 辑:顾卫宇
标 准 书 号:ISBN 7-301-05229-4/O·0513
出　版　者:北京大学出版社
地　　址:北京市海淀区中关村北京大学校内　100871
网　　址:http://cbs.pku.edu.cn/cbs.htm
电　　话:出版部 62752015　发行部 62754140　理科编辑部 62752021
电 子 信 箱:zpup@pup.pku.edu.cn
排　印　者:北京大学印刷厂
发　行　者:北京大学出版社
经　销　者:新华书店
890 毫米×1240 毫米　A5 开本　10.625 印张　306 千字
2001 年 9 月第 1 版　2001 年 9 月第 1 次印刷
定　　价:17.00 元

作者前言

原子和亚原子物理学包括原子物理、原子核物理和粒子物理三部分内容，是在经典物理的力学、热学、电磁学和光学课程以后，为大学本科生开设的近代物理课程. 力学、热学、电磁学和光学是 19 世纪完备起来的，而原子和亚原子物理学是 20 世纪初，随着量子力学的发展而不断深入的.

原子和亚原子物理学的第一个特点是基础性. 它属于普通物理课程. 必须注重基本的物理实验、物理图象、物理思想和物理模型. 它研究的绝大多数微观体系包含三个以上的粒子，解决这些问题只能作近似. 在讲授本课程时，大学本科生一般还没有足够的数学物理方法和量子力学基础，不必强调复杂的数学推导.

第二个特点是创新性. 包括 2000 年在内的 94 项诺贝尔物理学奖中有 66 项是与原子和亚原子物理学直接相关的. 这些工作不仅是原子和亚原子物理学的重大突破，而且是前辈物理学家创造性研究的典范. 在教学中应该强调培养学生的创新能力.

第三个特点是它的发展性. 这门学科已经研究了一百余年了，但是人们对微观世界的了解仍然在不断深入，新的实验结果不断发现，新的物理模型、物理原理不断提出. 教材不必也不应该再遵循 20 世纪 30 年代教科书的体系，即从原子光谱到玻尔轨道量子化的旧量子论，再以玻尔理论为基础讲授原子物理的思路. 在教学中应该及时增加这个学科的最新进展.

本书从以上三个基本特点出发，对原子物理和粒子物理部分的教材体系作了彻底改革，对原子核物理部分作了充实提高；从量子力学的基本原理出发，阐明原子和亚原子理论. 作者尽可能多地介绍新的发现和新的理论，尽可能多地介绍诺贝尔物理学奖，尽可能多地介绍现代科学技术，尽可能多地介绍相关的参考文献，而力图反映这个学科目前发展的现状和正在研究的前沿.

在本书付印时，我想我只是进行了原子和亚原子物理学教材改革的一种探索，提出了原子和亚原子物理学教学改革的一种新思路．同时也深感学识的浅薄和时间的仓促．本书中肯定有许多不妥或错误之处，诚恳希望读者指正．

高政祥

2001年8月于北京大学畅春园

目　录

第一章　量子理论基础

1.1　从经典物理到量子物理

1900年4月27日，开尔文(Lord Kelvin)[①]在《十九世纪热和光的动力理论上空的乌云》的长篇讲话中，认为经典物理学是万里晴空，但在上世纪末出现了两朵"乌云"，其中第一朵"乌云"是"以太漂移"的"零结果"；第二朵"乌云"是能量均分定理应用于固体比热的失败. 而后来这恰恰引起了物理学一场深刻的变革，前者推动了相对论的研究，后者孕育了量子物理学.

1.1.1　黑体辐射

基尔霍夫定律

同一物体的辐射本领和吸收本领之间有着内在的联系. 基尔霍夫(G. R. Kirchhoff)1859年提出：任何物体在同一温度 T 下的辐射本领 $r(\nu,T)$ 与吸收本领 $\alpha(\nu,T)$ 成正比，其比值只与 ν 和 T 有关：

$$\frac{r(\nu,T)}{\alpha(\nu,T)} = \frac{c}{4}\rho(\nu,T). \tag{1.1.1}$$

在热平衡下的辐射场，应是均匀、稳恒和各向同性的，其能量谱密度 $\rho(\nu,T)$ 必定为 ν 和 T 惟一地确定. $\rho(\nu,T)$ 是与物质无关的普适函数，称为热辐射的标准能谱. 在实验和理论上探求普适函数 $\rho(\nu,T)$ 成为当时物理学家解决热辐射问题的关键. 对吸收本领 $\alpha(\nu,T)=1$ 的绝对黑体，只要测出其发射本领 $r(\nu,T)$，就得到热辐射能量谱 $\rho(\nu,T)$. 有时将热辐射能量谱表示成波长和温度的函数 $\rho(\lambda,T)$.

---

① Lord Kelvin, "19th Century Clouds Over the Dynamical Theory of Heat and Light", *Phil. Mag.* **2**(1901)1.

斯特藩定律

1879 年斯特藩(J. Stefan)总结实验数据提出黑体辐射(blackbody radiation)的总辐射本领与它的绝对温度的四次方成正比:

$$R(T) = \int_0^\infty r(\nu,T)\mathrm{d}\nu = \int_0^\infty \frac{c}{4}\rho(\lambda,T)\mathrm{d}\lambda = \sigma T^4, \quad (1.1.2)$$

其中 $\sigma = 5.670\times10^{-8}\ \mathrm{W/m^2\cdot K^4}$. 1884 年玻尔兹曼从热力学理论导出这一公式,故也称为斯特藩-玻尔兹曼公式.

例题 1.1.1　太阳半径为 $R_S = 7.0\times10^8\ \mathrm{m}$,太阳表面到地球表面的距离为 $r = 1.5\times10^{11}\ \mathrm{m}$,太阳表面的温度为 5750 K,求太阳辐射到地球表面单位面积的辐射通量,即太阳常数.

解　太阳辐射的总功率为 $\sigma T^4\cdot 4\pi R_S^2$,因为太阳表面到地球表面的距离为 r,因此太阳辐射到地球表面单位面积的辐射通量为:

$$\frac{\sigma T^4\cdot 4\pi R_S^2}{4\pi r^2} = \frac{\sigma T^4 R_S^2}{r^2} = 1.35\ \mathrm{kW/m^2}.$$

维恩定律

1893 年维恩(W. Wien)提出辐射能量分布定律:

$$\rho(\nu,T) = \frac{8\pi\alpha}{c^3}\nu^3 e^{-\beta\nu/T}, \quad (1.1.3)$$

其中 α,β 为两个常数. 这个公式只在波长较短、温度较低时才与实验结果相符,而在长波区域则系统地低于实验值. 见图 1.1.1.

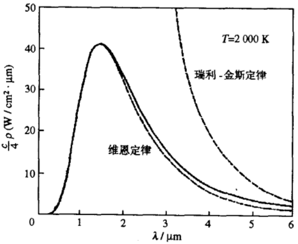


图 1.1.1　实线为一个温度为 2000 K 空腔的辐射通量谱的实验值.
虚线为维恩分布定律和瑞利-金斯定律的预言值.

维恩由(1.1.3)式推导出维恩位移定律：黑体辐射通量谱 $\rho(\lambda,T)$ 的峰值对应的波长 λ_{max} 与温度 T 成反比.

$$\lambda_{max}T = b, \tag{1.1.4}$$

其中常数 $b=2897.756(24)\mu m\cdot K$. 维恩因此获1911年诺贝尔物理学奖.

例题 1.1.2　太阳光谱连续部分极大值位于 $\lambda_{min}=5100$ Å，求太阳表面的温度.

解　应用维恩位移定律易得太阳表面的温度为 5700 K.

瑞利-金斯定律和“紫外灾难”

1900年瑞利 (L. Rayleigh) 根据能量均分定理，推导了辐射定律，他导得的公式错了一个因子8，后被金斯 (J. H. Jeans) 所纠正. 他们认为空腔内的电磁辐射形成一切可能形成的驻波，其节点在空腔壁处，由此得到辐射场中单位体积内频率 ν 附近单位频率间隔内电磁辐射的振动模数①：

$$N(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}, \tag{1.1.5}$$

这也就是辐射场的自由度数目. 根据经典的能量均分定理，当系统处于热平衡时，每个自由度的平衡能量为：

$$\bar{\varepsilon} = kT. \tag{1.1.6}$$

由此可得瑞利-金斯公式：

$$\rho(\nu,T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT. \tag{1.1.7}$$

当频率较低时，瑞利-金斯定律的理论值与实验结果符合较好. 但当频率较高时，就与实验结果有很大差异. 在紫外端发散. 曾被埃伦菲斯特 (P. Ehrenfest) 称为“紫外灾难”. 如图 1.1.1 所示.

普朗克的量子假设

基尔霍夫的学生普朗克利用有电磁阻尼情况下的受迫振子模型，根据经典力学和经典电磁规律，在1899年导出了在达到平衡时辐射场的能量密度（单位体积内在 ν 附近单位频率间隔中的辐射能

---

① 赵凯华、罗蔚茵，量子物理学，高等教育出版社，2000，第10页.

量)$\rho(\nu)$与振子平均能量 $\bar{\varepsilon}$ 的关系式：

$$\rho(\nu) = 8\pi\nu^2\bar{\varepsilon}/c^3. \tag{1.1.8}$$

普朗克将式 (1.1.8) 与维恩公式 (1.1.3)比较，并考虑到低频区的实验结果，采用内差法得出辐射的能量密度为：

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi\alpha}{c^3}\nu^3[e^{\gamma\nu/T} - 1]^{-1}, \tag{1.1.9}$$

与式 (1.1.8) 相比，可得振子的平均能量

$$\bar{\varepsilon} = \alpha\nu(e^{\gamma\nu/T} - 1)^{-1}. \tag{1.1.10}$$

1900 年 10 月 19 日，普朗克在德国物理学会的会议上发表了上述结果①. 在提出公式的当天，鲁本斯(H. Rubens)立刻将这个公式与卢默(O. Lummer)和普林斯海默(E. Pringsheim)测得的当时最精确的实验结果进行核对，发现"在任何情况下都完全令人满意地相符". 第二天清晨，鲁本斯立即将这一结果告诉了普朗克，并深信在普朗克公式中包含着极其重要的涵义，绝不可能是一个偶然的巧合. 普朗克很清楚"即使这个新的公式能证明是绝对精确的，但是如果仅仅是一个侥幸猜测出来的内插公式，那么它的价值也是有限的."因此必须进一步找出它的理论依据，关键是要在理论上找出振子的平均能量. 普朗克经过八个星期的紧张工作后，在 1900 年 12 月 24 日德国物理学会的圣诞会上宣读了题为《关于正常光谱的能量分布定律》的论文. 提出了能量量子化的假设：(1) 黑体的腔壁是由无数个带电的谐振子组成的，这些谐振子不断地吸收和辐射电磁波，与腔内的辐射场交换能量；(2) 这些谐振子所具有的能量是分立的，它的能量与其振动频率 ν 成正比：

$$\varepsilon_0 = h\nu, \tag{1.1.11}$$

式中的 h 即为普朗克常数. 振子与辐射场交换的能量 ε 是一个离散的变量，只能取基本单元能量子(quantum of energy) ε_0 的整数倍：

$$\varepsilon_n = n\varepsilon_0, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{1.1.12}$$

由于能量取离散值，因此利用统计理论求平均值时采用求和得：

① M. Plank, *Ann. der Physik*, **4**(1901)553.

$$\bar{\varepsilon}=\frac{\sum_{n=0}^{\infty}n\varepsilon_0 e^{-n\varepsilon_0/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty}e^{-n\varepsilon_0/kT}}=\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\sum_{n=0}^{\infty}e^{-n\varepsilon_0\beta}\right)=\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(1-e^{-\beta\varepsilon_0})$$

$$=\frac{\varepsilon_0 e^{-\beta\varepsilon_0}}{1-e^{-\beta\varepsilon_0}}=\frac{\varepsilon_0}{e^{\beta\varepsilon_0}-1}=\frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1}. \tag{1.1.13}$$

从而定出常数 $\alpha=h,\gamma=h/k$. 代入 (1.1.8)式可得能量密度：

$$\rho(\nu,T)=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\cdot\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}. \tag{1.1.14}$$

这就是普朗克公式，用波长表示：

$$\rho(\nu,T)d\nu=\rho(\nu,T)\frac{d\nu}{d\lambda}d\lambda=-\rho(\lambda,T)d\lambda,$$

$$\frac{d\nu}{d\lambda}=-\frac{c}{\lambda^2},\quad \rho(\lambda,T)=\frac{8\pi hc}{\lambda^5}\cdot\frac{1}{e^{hc/\lambda kT}-1},$$

$$\rho(\lambda,T)=\frac{8\pi hc}{\lambda^5}\cdot\frac{1}{e^{hc/\lambda kT}-1}. \tag{1.1.15}$$

1900 年 12 月 24 日被认为是量子论的诞生之日. 有趣的是在普朗克公式正式提出后的五年之中，没有人对其加以理会，很多物理学家觉得太离谱. 直到 1905 年爱因斯坦才提出光量子，支持普朗克的量子论. 由于量子化的概念同经典物理严重背离，因此在以后的十余年内，普朗克很后悔当时提出“量子论”，并想尽办法试图将它纳入经典范畴. 在各种经典解释都碰壁后，才深刻理解到量子论的真正的深刻的含义[①]. 普朗克因此获 1918 年诺贝尔物理学奖.

例题 1.1.3 天狼星 (Sirius)、太阳 (Sun) 和猎户座 α (Betelgause) 辐射强度最大的波长 λ_{max} 分别为：240 nm，500 nm 和 850 nm. 将天体辐射看成是黑体辐射，不会引起很大的误差. 求：(1) 这些天体表面的温度. (2) 辐射强度 R. (3) 太阳 (半径为 7.0×10^8 m) 和猎户座 α(半径为 4.0×10^{11} m) 的辐射总功率 N.

解 (1) $T=2898\ \mu m\cdot K/\lambda_{max}$，代入，得天狼星、太阳和猎户座 α 的表面温度分别为：12000 K；5800 K；3400 K.

① M. J. Klein, *Physics Today*, **19**(1966)23.

(2) $R=\sigma T^4$，代入，得天狼星、太阳和猎户座 α 的辐射强度分别为：$1.2\times10^9\ \mathrm{W/m^2}$；$6.4\times10^7\ \mathrm{W/m^2}$；$7.7\times10^6\ \mathrm{W/m^2}$.

(3) $N=RS=R(4\pi r^2)$，代入，得太阳和猎户座 α 的辐射总功率分别为：$3.9\times10^{26}\ \mathrm{W}$；$1.5\times10^{31}\ \mathrm{W}$.

例题 1.1.4 试由普朗克公式推导出维恩公式、瑞利-金斯公式、斯特藩定律.

解 $h\nu\gg k_BT$ 时，$e^{h\nu/kT}\gg1$，

$$\rho(\nu,T)=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\cdot\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}e^{-h\nu/kT};$$

$h\nu\ll k_BT$ 时，$e^{h\nu/kT}\sim1+h\nu/k_BT$，$\rho(\nu,T)=\frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT$；

$$\begin{aligned}R(T)&=\int_0^\infty r(\nu,T)\mathrm{d}\nu=\frac{c}{4}\int_0^\infty\rho(\nu,T)\mathrm{d}\nu\\&=\frac{2\pi h}{c^2}\left(\frac{kT}{h}\right)^4\int_0^\infty\frac{x^3\mathrm{d}x}{e^x-1}\\&=\frac{2\pi h}{c^2}\left(\frac{kT}{h}\right)^4\frac{\pi^4}{15}\\&=\frac{2\pi^5k_B^4}{15c^2h^3}T^4.\end{aligned}$$

1.1.2 量子论的建立

爱因斯坦关于光电效应的量子理论

1905 年 3 月，爱因斯坦在德国《物理学纪事》上发表题为《关于光的产生和转化的一个启发性的观点》①，提出用光量子(light quantum)或光子(photon)的概念处理光电效应中碰到的疑难. 他认为辐射场就是由光量子组成的，每一个光量子的能量 E 与辐射频率 ν 的关系为：

$$E=h\nu,\tag{1.1.16}$$

当光照射到金属表面时，一个光子的能量可以立刻被金属中的自由电子吸收，但是，只有当每个光量子的频率足够大时，电子才能克服

① A. Einstein, *Ann. der Physik*, **17**(1905)132.

金属的脱出功 A 而逸出金属表面，逸出电子的动能为：

$$E_k = h\nu - A, \tag{1.1.17}$$

1906 年 3 月和 11 月爱因斯坦发表了《论光的产生和吸收》、《普朗克的辐射和比热理论》，支持了普朗克的能量量子理论，并首次用量子理论解决了固体比热问题. 爱因斯坦因此获 1921 年诺贝尔物理学奖.

巴耳末公式和里德伯方程

1885 年观测到的氢原子光谱线已有 14 条，巴耳末(J. J. Balmer)提出氢原子谱线波长可以用一个简单的公式表示：

$$\lambda = B\frac{n^2}{n^2-4}, \quad n = 3,4,5,\cdots, \tag{1.1.18}$$

式中 $B=3645.6\,\text{Å}$. 如果令 $\tilde{\nu}=\frac{1}{\lambda}$，$\tilde{\nu}$ 称为波数，巴耳末公式可以改写为：

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{B}\frac{n^2-4}{n^2} = \frac{4}{B}\left[\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right], \quad n = 3,4,5,\cdots, \tag{1.1.19}$$

后人称此公式为巴耳末公式，由此公式确定的一组氢原子光谱线都在可见光区，称为巴耳末系.

1889 年里德伯(J. R. Rydberg)在不知道巴耳末工作的情况下，提出了一个普遍的方程：

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H\left[\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right] = T(n') - T(n), \tag{1.1.20}$$

氢原子的所有谱线都可以用这个方程表示. 其中 $R_H = 1.096\,775\,8\times10^7\,\text{m}^{-1}$，称为里德伯常数. $T(n)$ 称为光谱项，n 和 n' 为正整数. 当 $n'=2$，$n=3,4,5,\cdots$ 时，正是巴耳末公式. 氢原子光谱的其他谱线不断地被发现，一个在紫外区，1908 年莱曼(T. Lyman)发现了 $n'=1$，$n=2,3,4,\cdots$ 的莱曼系；还有三个在红外区，1908 年帕邢(F. Paschen)发现了 $n'=3$，$n=4,5,6,\cdots$ 的帕邢系；1924 年布拉开(F. Brachett)发现了 $n'=4$，$n=5,6,7,\cdots$ 的布拉开系；1924 年普丰特(H. A. Pfund)发现了 $n'=5$，$n=6,7,8,\cdots$ 的普丰特系.

巴耳末公式和里德伯方程是实验结果的总结，完全是凭经验凑

出来的.它们将看来非常复杂的氢原子光谱线波数如此简单地表示出来,是一个惊人的成就.因此可以总结出氢原子光谱的重要规律:谱线有确定的波长,是彼此分立的;每一谱线的波数都可以表示为两个光谱项之差;谱线可以按照一定规律组成谱线系,不同谱线系之间用共同的光谱项.

玻尔的定态能级理论

1912年玻尔(N. Bohr)在卢瑟福实验室参加了α粒子散射的实验工作,认为要解决有核原子的稳定性问题,"只有量子假说是摆脱困难的惟一出路".1913年2月之前,玻尔还不知道巴耳末公式.二月中,当他从好友那儿一看到巴耳末和里德伯公式,就对原子的稳定性问题全都清楚了.1913年[①]他在《哲学杂志》上连续发表了数篇论文,创造性地将光的量子理论引入到原子结构理论中来.提出了定态假说和频率假说:在原子系统中存在一系列的定态,电子在这些定态的能量取离散值,原子在定态中不发射也不吸收电磁辐射能.原子在两个定态能级 $E_n>E_m$ 跃迁时,发射或吸收的电磁辐射的频率 ν 满足 $h\nu=E_n-E_m$.原子系统的每个变化只能从一个定态完全跃迁到另一个定态.这是玻尔很了不起的创见.玻尔对于轨道量子化作了大胆的假设:设轨道角动量为 $l_n=n\hbar$,由此求出了氢原子的能级公式:

$$E_n=-\frac{2\pi^2me^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2h^2n^2},\quad n=1,2,3,\cdots. \tag{1.1.21}$$

由此他获得了1922年诺贝尔物理学奖.

夫兰克-赫兹实验

在玻尔理论发表的第二年,即1914年,夫兰克(J. Franck)和赫兹(G. Hertz)用电子碰撞原子的方法,使原子从低能级激发到高能级,证明了原子能级的存在.

夫兰克和赫兹最初进行实验的装置如图1.1.2所示,将玻璃容器中的空气抽出,注入少量的汞.电子由热阴极灯丝 F 发射,在 F 与栅极 G 之间加一电压 V 使电子加速.在 G 与接收极 P 之间有一0.5 V的反电压 V_0.改变 FG 之间的电压,测量流过接收极 P 的电

① N. Bohr, *Phi. Mag.* **26** (1913) 1, 471, 857.

流，得到了如图 1.1.3 所示的结果. 图中显示当 FG 之间的电压由零逐渐增加时，P 极电流逐渐上升，当电压达到 4.9 V 时，电流突然下降，然后又上升，当电压达到 9.8 V 时，电流又突然下降，然后再上升，当电压达到 14.7 V 时，电流又下降. 这三个电压之间相差 4.9 V，这样，当 FG 之间的电压在 4.9 V 的整数倍时，电流突然下降.

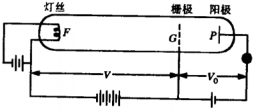


图 1.1.2　夫兰克-赫兹实验装置

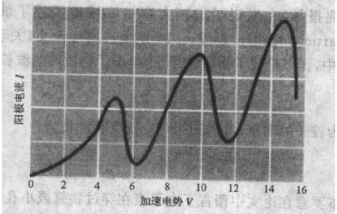


图 1.1.3　汞的第一激发电势的测量

这一实验结果被解释为：当 FG 之间的电压低于 4.9 V 时，电子在 FG 之间被加速而得到的能量较低，与汞原子碰撞不足以影响其内部的能量. 当 FG 之间的电压达到 4.9 V 时，电子可能在栅极 G 处与汞原子碰撞，将加速获得的全部能量传递给汞原子，使汞原子从基态激发到最近的一个能量较高的能态，电子失去能量后，由于不能克服在 GP 之间 0.5 V 的反电压，不能到达 P，电流下降. 等到 FG 之间的电压超过 4.9 V 较多时，电子与汞原子碰撞后，还留有足够的能量克服反电势而到达 P 极，电流又开始上升.

当 FG 之间的电压是二倍 4.9 V 时，电子可能在栅极 G 处与汞原子两次碰撞而失去能量，造成电流下降. 同理当 FG 之间的电压是三倍 4.9 V 时，电子可能在栅极 G 处与汞原子三次碰撞而失去能量，造成电流再次下降. 这说明汞原子的第一激发态比基态能量高 4.9 eV. 如果汞原子从第一激发态又跃迁回基态，就可能有 4.9 eV 的能量的光子放出. 其波长为：

$$\lambda = \frac{hc}{4.9\ \mathrm{eV}} \approx 2500\,\text{Å}. \qquad (1.1.22)$$

实验中确实观测到了此光谱线，波长为 2537 Å. 从而证实了原子内部能级的存在. 夫兰克和赫兹因此获得了 1925 年诺贝尔物理学奖.

德布罗意波

路易斯·德布罗意(Louis de Broglie)1923 年 10 月 8 日在《法国科学院报导》上发表了三篇文章[①]，系统地阐述了波粒二象性(wave-particle duality)思想，1924 年他在博士论文《关于量子理论的研究》中，详细论述了物质波思想，提出了物质波的波长关系式：

$$\lambda = \frac{h}{p}, \qquad (1.1.23)$$

其中 p 为粒子的动量，考虑到相对论效应其波长为：

$$\lambda = \frac{h}{mv}\sqrt{1-\beta^2} = \frac{hc}{\sqrt{E^2 - m^2c^4}}. \qquad (1.1.24)$$

德布罗意在论文中预言了电子束在穿过狭缝或小孔时会像光一样，产生衍射现象. 由此他获得了 1929 年诺贝尔物理学奖.

由于 h 是一个很小的量，大质量的物质粒子的波长一般是非常短的，因此在通常宏观情况下，波动性没有显现出来，但是在质量非常小的原子、原子核和粒子的微观情况下，物质粒子的波动性就会显现出来.

1927 年戴维孙(C. J. Davisson)和盖末(L. H. Germer)[②]用低速电子进行实验，获得了电子衍射的图样；同年，汤姆孙(G. P.

---

① L. de Broglie, *Comptes Rendus* **177** (1923) 507; *Nature* **112** (1923) 540.

② G. J. Davisson and L. H. Germer, *Phys. Rev.*, **30**(1927)705.

Thomson)[①]用高速电子进行实验，也获得了电子衍射的图样.完全证实了德布罗意假说的正确性.由此他们获得了1937年诺贝尔物理学奖.X射线衍射和电子衍射的比较见图1.1.4.

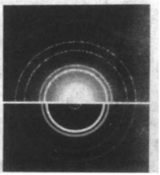


图1.1.4 X射线衍射和电子衍射的比较.上图显示0.071 nm的X射线被铝箔散射的结果.下图显示600 eV的电子被铝箔散射的结果.X射线和电子波长的差别导致两图尺度不同.

1961年C. Jönsson[②]用特殊的工艺在薄金属片上制得五条窄缝，每条缝长50 μm，宽0.3 μm，缝间隔1 μm.用50 kV电压加速电子，足够细的电子束分别通过薄片上的单缝、双缝、…、五缝，在距窄缝35 cm处得到的衍射和干涉图样与光的相似，相对强度和位置与光学计算一致.图1.1.5显示了电子的双缝衍射.

1976年G. F. Missiroli等人[③]用电子显微镜加入一个电子双棱镜系统，直接用像增强器观测放大的干涉图象.随着电子流密度的增加，开始时只有几个亮点，逐渐隐约可见干涉条纹，最后看到有规律的清晰的干涉条纹.这一单电子干涉现象表明电子的波动性不是经典的波动，而是同一电子不同量子态之间的干涉.

1993年M. F. Crommie等人[④]把蒸发到铜(111)晶面的铁原子用扫描隧道显微镜的探针排列成半径为7.13 nm的圆环，称为量子围栏(quantum corral)，在这些铁原子形成的圆环内，铜的表面态电子波受到铁原子的强散射作用，与入射电子波发生干涉，形成驻波.实验观测到了在围栏内同心圆状的驻波，直观地证实了电子的波动性.

---

① G. P. Thomson, *Proc. Roy. Soc.*, *A*(London)**117**(1928) 600; *Nature*, **120** (1927) 802.

② C. Jönsson, *Z. Phy.* **161**(1961) 454; *Am. J. Phys.* **42**(1974)4.

③ G. F. Missiroli and G. Pozzi, *American Journal of Physics* **44**(1976)306.

④ M. F. Crommie, C. P. Lutz, D. M. Eigler, *Science* **262**(1993)218.

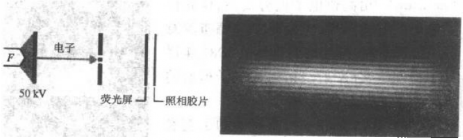


图 1.1.5　电子的双缝衍射. 从灯丝发射的电子经过 50 kV 加速后，通过双缝后的干涉条纹.①

经典的粒子与波动和量子的波粒二象性

经典的粒子概念，除它具有一定的质量、电荷等属性，即物质的原子性之外，还总是和轨道概念联系在一起，一切粒子皆作轨道运动. 对于微观粒子，经典轨道概念必须放弃. 经典波动概念总是和某种实际的物理量联系在一起的，这些物理量(如位移矢量、电场强度矢量)可以实际测量. 对于微观粒子，它所相应的物质波是不能实际测量的.

经典的粒子和波永远不能统一到一个客体上去，而微观粒子的粒子性和波动性则可以统一到一个客体上. 德布罗意提出的物质波，不是经典波那样代表什么实在的物理量的波动，而是刻画粒子在空间的概率分布的概率波. 把微观粒子的粒子性(原子性)和波动性(叠加性)统一起来的必然是概率波. 波粒二象性必然导致事物的统计解释，统计性把波和粒子两个概念联系了起来.

1.1.3　量子力学的数学描述

海森伯的矩阵力学

1925 年 7 月，海森伯 (W. K. Heisenberg)②写了《关于运动学和动力学关系的量子论的新解释》，为矩阵力学的建立奠定了基础. 1927 年提出不确定关系. 由此他获得了 1932 年诺贝尔物理学奖.

---

① C. Jönsson, *Am. J. Phys.* **42**(1974)4.

② W. Heisenberg *Zeit. Physik* **33**(1925)879.

薛定谔的波动力学

在海森伯、玻恩、约当等人创立矩阵力学的同时，1925 年薛定谔(E. Schrödinger)①通过另一条途径创立了波动力学. 薛定谔方程(Schrödinger equation)是量子力学的基本方程. 由此他和狄拉克获得了 1933 年诺贝尔物理学奖.

狄拉克的相对论量子力学

1928 年狄拉克 (P. A. M. Dirac)②又从一些更普遍的假设出发，建立了相对论量子力学. 狄拉克用它计算了氢原子能级的精细结构，从理论上提出了自旋磁矩的存在，并且预言了正电子的存在. 由此他和薛定谔获得了 1933 年诺贝尔物理学奖.

习　题

1.1.1　太阳的半径为 6.95×10^{8} m，辐射的峰值波长 $\lambda_m=0.470$ μm，太阳与地球的距离为 1.49×10^{11} m，视太阳为黑体，(1) 若同时视地球为黑体，并忽略大气变化等因素，仅考虑地球处于太阳的热辐射情况下，求太阳和地球的温度；(2) 设地球的全吸收系数 $A=0.9$，求地球的温度.

1.1.2　一块钾箔离一功率为 1.0 W，波长为 5893 Å 的光源 0.5 m，(1) 按照经典理论需要多长时间钾箔才能从光源吸收足够的能量 (=1.8 eV)，逐出一个电子. 假定被逐出的光电子从半径为 1.3×10^{-10} m 的圆面积获得能量. (2) 按照量子理论每单位面积光子以多大的光子数速率撞击钾箔.

1.1.3　钠黄光的发射谱线波长为 589 nm，问具有多大动能的电子有相同的德布罗意波长？若一个质子的波长为 0.113 pm，求质子的速度.

1.1.4　计算德布罗意波长：(1) 一个质量为 1.0×10^{-15} kg 以 2.0 mm/s 速度运动的病毒粒子；(2) 动能为 100 eV 的电子. (3)目前世界上能量最高的电子加速器是西欧中心的 LEP，电子能量为 50 GeV，求其德布罗意波长.

1.1.5　用激光冷却法可以将原子冷却到极低的温度，试求 ^{133}Cs 原子在 1 mK温度时的德布罗意波长. 原子的温度是由其动能决定的.

1.1.6　德布罗意提出，可以将原子定态与驻波联系起来. 原子中的电子波绕原子核传播一周后，驻波应光滑地衔接起来，电子的轨道周长等于电子波长

---

① E. Schrödinger *Annalen der Physik* **79**(1926)36,489;**80**(1926)437;**81**(1926)109.

② P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* (*London*)**A117**(1927)243,710.

的整数倍. 试由此求氢原子定态的动量和角动量.

1.2 量子力学的基本原理

1.2.1 波函数的性质

概率幅

在波动光学中有复振幅的概念,复振幅绝对值的平方等于光的强度. 在量子理论中,也需要有类似的复振幅的概念,这个复振幅称为概率幅 $\psi(\boldsymbol{r},t)$(probability amplitude), 1927 年玻恩 (Max Born)[①]提出复振幅的绝对值的平方等于在空间 $\boldsymbol{r}$ 点在时刻 t 找到粒子的概率. 因此描述粒子状态的波是概率波. 由此他获得了 1954 年诺贝尔物理学奖.

归一性

复振幅也称为波函数(wave function). 描写微观粒子状态的波函数的归一化是很重要的. 在整个空间总能找到粒子,即粒子在全空间出现的概率为 1,所以:

$$\int |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \mathrm{d}\tau = 1. \tag{1.2.1}$$

有限、连续、单值

上式要求波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$在整个空间平方可积,这就要求波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$是有限的;同时因为概率不会在某处发生突变,就要求$\psi(\boldsymbol{r},t)$和$\frac{\partial}{\partial x}\psi(\boldsymbol{r},t)$,$\frac{\partial}{\partial y}\psi(\boldsymbol{r},t)$,$\frac{\partial}{\partial z}\psi(\boldsymbol{r},t)$处处连续;在空间任一点,只有一个概率值,因此$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 必须是单值函数. 这有限、连续、单值构成了波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$的标准化条件. 但是对于波函数$\psi(\boldsymbol{r},t)$和 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\psi(\boldsymbol{r},t)$有 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 = |\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$,因此具有相同几率密度的波函数是不惟一的.

宇称

这里的宇称(parity)是指空间宇称,描述的是空间坐标反射时

---

① Max Born, Atomic Physics, Hafner Pub. Co. (1962).

（即 $\boldsymbol{r}\to-\boldsymbol{r}$）波函数的对称性. 空间反射下波函数的数值和符号都不变的称为偶宇称，空间反射下波函数的数值不变，但符号改变的称为奇宇称，由多个粒子组成的系统的总宇称等于组成粒子的宇称乘积再乘上轨道运动宇称. 实验发现，在电磁相互作用和强相互作用中宇称是守恒的. 杨振宁和李政道在分析了各种实验事实后提出，在弱相互作用中宇称可能是不守恒的. 吴健雄很快在^{60}Co 的衰变实验中观察到了宇称不守恒现象.

1.2.2 态叠加原理

双缝干涉实验

在光学中双缝干涉实验用光的波动理论作了满意的解释. 假设用电子枪代替光束，如果电子只具有物质的粒子性，好像机枪子弹穿过双缝，按照经典理论不可能产生如用光束时的干涉条纹. 但约恩孙(C. Jönsson)1961 年用 5 缝、1974 年用双缝，A. Tonomura 1989 年用双缝成功地获得了清晰的干涉条纹. 无论入射粒子束的强度减弱到什么程度，即使是一个一个粒子通过，只要时间足够长，清晰的双缝干涉图象始终可以得到. 费曼曾说："这些实验都是用经典方法绝对不能解释的，但是量子力学的核心正是包含在这些实验之中."

态叠加原理

在双缝干涉实验中，如果用 ψ_1 表示粒子穿过上窄缝到达屏的状态，ψ_2 表示粒子穿过下窄缝到达屏的状态，ψ 表示粒子穿过双缝到达屏的状态. 则 $\psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2$，其中 c_1 和 c_2 为复数. 一般情况下，如果 ψ_1 和 ψ_2 是体系的可能状态，则它们的线性叠加$\psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2$也是这个体系的一个可能状态. 这就是量子力学的态叠加原理(principle of superposition of states). 费曼称它是量子力学第一原理. 量子力学中态叠加，数学形式虽然与经典波的叠加相同，但物理本质上有根本的差异. 这里是一个粒子两个态的叠加，且干涉是粒子自己与自己干涉，决不是两个粒子干涉，而且这种态叠加，将导致在叠加态下物理量的不确定性.

按照态叠加原理，粒子在屏上某一点 P 出现的几率密度为：

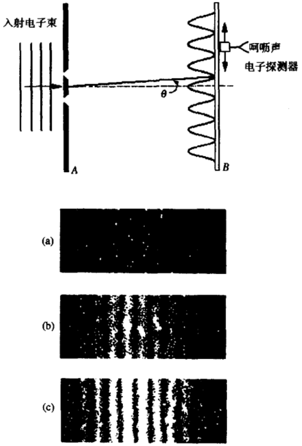


图 1.2.1　电子双缝干涉实验.上图为双缝干涉实验示意图.下图显示随着电子数的增加,电子接受屏上的图案由随机分布,逐渐变成了规则的干涉条纹.

$$|\psi|^2 = |c_1\psi_1 + c_2\psi_2|^2$$
$$= |c_1\psi_1|^2 + |c_2\psi_2|^2 + c_1^* c_2 \psi_1^* \psi_2 + c_1 c_2^* \psi_1 \psi_2^*, \quad (1.2.2)$$

右边第一项是粒子穿过上窄缝出现在 P 点的几率密度,第二项是粒子穿过下窄缝出现在 P 点的几率密度,第三第四项是干涉项.干涉图象证实了干涉项的存在.

波函数的平面波叠加

按照态叠加原理,在晶体表面反射后,粒子的状态可以表示为其动量 $\boldsymbol{p}$ 取各种可能值的平面波的线性叠加,由于动量可以取连续

值，因此：

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_{-\infty}^{\infty}\varphi(\boldsymbol{p},t)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z, \qquad (1.2.3)$$

由傅里叶变换得：

$$\varphi(\boldsymbol{p},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_{-\infty}^{\infty}\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z. \qquad (1.2.4)$$

这里 $\psi(\boldsymbol{r},t)$和 $\varphi(\boldsymbol{p},t)$是同一种状态的两种不同的描述方式：$\psi(\boldsymbol{r},t)$称为粒子的量子态在坐标表象中的表示，$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 表示粒子在 $\boldsymbol{r}$ 空间分布的几率密度；$\varphi(\boldsymbol{p},t)$称为粒子的同一量子态在动量表象中的表示，$|\varphi(\boldsymbol{p},t)|^2$ 表示粒子动量分布的几率密度.

1.2.3 不确定原理(uncertainty principle)

不确定原理

根据德布罗意的假设，物质粒子具有波粒二象性，如何用波来描述粒子呢？可以用各种波长的波叠加成波包(wave packet)，条件是这种波包不能随时间散开. 如果要叠加成空间范围比较小的波包，对应粒子的位置比较确定，就需要用波长范围比较大的波来叠加，这样其动量就比较不确定. 反之，如果采用波长范围比较小的波叠加，对应粒子的动量比较确定，就只能叠加出空间范围比较大的波包，这样其位置就比较不确定. 叠加在数学上是用傅里叶分析进行的，它给出：

$$\Delta x\cdot\Delta k\sim 1, \qquad (1.2.5)$$

对于自由粒子 $p=\hbar k$，上式变为：

$$\Delta x\cdot\Delta p\sim\hbar. \qquad (1.2.6)$$

1927 年海森伯提出：粒子在客观上不能同时具有确定的坐标位置及相应的动量：

$$\Delta x\cdot\Delta p\geqslant\hbar, \qquad (1.2.7)$$

式中 Δx，Δp 分别表示粒子坐标和动量的不确定度. 海森伯的不确定关系从数学上描述了微观粒子波粒二象性. 一个物理量 A 的平均值为 $\overline{A}$，则其不确定度为：

$$\Delta A = \sqrt{\overline{[(A-\overline{A})^2]}}. \tag{1.2.8}$$

由量子力学可以严格导出不确定关系为：

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2}, \Delta y \cdot \Delta p_y \geqslant \frac{\hbar}{2}, \Delta z \cdot \Delta p_z \geqslant \frac{\hbar}{2}; \tag{1.2.9}$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geqslant \frac{\hbar}{2}; \tag{1.2.10}$$

$$\Delta \phi \Delta L_z \geqslant \frac{\hbar}{2}. \tag{1.2.11}$$

这是对于微观体系所处状态进行多次测量的统计偏差，正好是描写微观粒子统计规律的定量反映. 初次接触不确定原理，容易觉得它把很简单、很直观的东西搞得不确定了，贝特(H. A. Bethe)对学生说过："许多人相信不确定原理把一切搞得不确定了. 实际上正好相反. 如果没有量子力学和这个原理，在物质的性质和行为上就不可能有任何确定性. 所以它实际上是确定性原则. "

不确定关系不是由测量仪器或测量技术造成的，而是微观粒子本身的属性所决定的. 在这个意义上，"测不准关系"容易使人误解. 不确定关系不是给物理学带来了不精确性，而正是反映了微观世界的精确性. 在双缝干涉实验中，虽然电子在某时刻落在何处不能确定，但电子落入给定区域的概率是完全确定的. 轨道的概念在经典力学中是以坐标和动量有同时确定值为前提的，因而轨道概念不适用于微观粒子.

对 $\Delta t \cdot \Delta E \geqslant \frac{\hbar}{2}$，所谓测量时间愈短，能量的不确定度愈大的理解是不恰当的. Δt 只能表示状态过程变化快慢的特征时间，或表示当体系的物理性质有明显变化时所需的最小时间间隔. 例如，处于激发态的原子是不稳定的，它或迟或早地会跃迁到低能级直至基态. 平均地说，某种原子处于某激发态的时间间隔 Δt 是一定的. 通常称为该状态的平均寿命 τ. 因此，根据不确定关系，由于只能在时间 τ 范围内测量，测得的体系能量必定有一分布，宽度为 ΔE，满足关系

$$\tau \Delta E \sim \hbar. \tag{1.2.12}$$

因此，原子定态能级应有一定的宽度. 这个关系式有很重要的实

际用途. 在理论上通过计算不稳定状态的平均寿命，来估计能量的变化范围. 在实验上可根据测得的能谱宽度，来估计不稳定状态的平均寿命，或根据测得的粒子的寿命，来估算粒子的能量宽度.

因为角动量 L 的本征态是环形波，除角动量的大小确定外，只能再确定它在一个方向的投影 L_z，角动量 L 的幅角 ϕ 与它在 z 方向的投影 L_z 之间满足不确定关系.

例题 1.2.1 (1) 假设氢原子中的电子在 x 方向以 1.88×10^6 m/s 速度运动，你能测得的速度的精度为 1%，你同时测准该电子位置的范围是多少？(2) 一个质量为 45 g 的高尔夫球的速度为 40 m/s，测量精度也为 1%，在不确定原理下，测量高尔夫球位置的精度范围是多少？

解

(1) 电子的动量为：$p_x = mv_x = 1.71\times10^{-24}$ kg · m/s，

动量的不确定性为：$\Delta p_x = 1.71\times10^{-26}$ kg · m/s，

位置的不确定性为：$\Delta x \sim \dfrac{\hbar}{\Delta p_x} = 6.2$ nm，

这个值是氢原子玻尔半径的几十倍，这样就无法确定氢原子中电子的位置.

(2) 高尔夫球位置的精度范围为：6×10^{-31} m，这样小的不确定性完全可以被忽略.

例题 1.2.2 1935 年日本汤川秀树提出原子核中核力的介子理论，获得了 1949 年诺贝尔物理奖. 试用不确定关系估算出媒介粒子的质量约为电子静止质量的 200 倍.

解 设媒介粒子生存时间为 Δt，以光速前进走过的距离为 $\Delta x = c\Delta t$，由不确定关系可得媒介粒子的能量变化为：$\Delta E = \hbar/\Delta t$，考虑核力，$\Delta x \sim 2.0$ fm. 如果这些能量全部转为媒介粒子的静止能，则媒介粒子的质量为：

$$mc^2 = \frac{\hbar c}{\Delta x} \approx 100\ \text{MeV},$$

约为电子静止质量的 200 倍.

对应原理

玻尔在量子力学建立前，曾经提出过“对应原理”(correspondence principle)：在大量子数极限下，量子论必定渐进地趋于经典理论．如氢原子辐射频谱在主量子数 n 很大的极限下，趋于经典计算的能谱．物理学中的任何一种理论，不论它的特性和细节如何，当把它应用于普遍性较小的理论所适用的情况时，这种新理论必定可化为由它对应的、已牢固确定的旧理论．

例题 1.2.3　一个用弹簧($k=3.0$ N/m)连接的物体($m=300$ g)，以 10 cm 的振幅振荡，将这个系统作为一个量子振子处理，求：(1) 相邻能级间的能量间隔；(2) 描述这个振子的量子数．

解

(1) 振动频率为 $\nu=\dfrac{1}{2\pi}\sqrt{\dfrac{k}{m}}=0.50\ \mathrm{s}^{-1}$，

相应的量子振子能量为：$\Delta E=h\nu=3.3\times10^{-34}\mathrm{J}$.

(2) 系统的总能量为：$E=\dfrac{1}{2}kA^2=0.015\ \mathrm{J}$，

量子数为：$n=\dfrac{E}{\Delta E}=4.6\times10^{31}$.

1.2.4　力学量算符

位置 $\boldsymbol{r}$ 及其函数的平均值

微观粒子处在波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 所描述的状态下，尽管不是所有的力学量都具有确定值，但它们都有确定的几率分布，因而有确定的平均值．根据波函数的统计诠释，对于位置 $\boldsymbol{r}$ 及其函数，例如势能 $U(\boldsymbol{r})$，可以求它们的平均值：

$$\bar{\boldsymbol{r}}=\langle \boldsymbol{r}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\boldsymbol{r}\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \qquad (1.2.13)$$

$$\overline{U(\boldsymbol{r})}=\langle U(\boldsymbol{r})\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})U(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \qquad (1.2.14)$$

动量的平均值及动量算符

根据不确定原理，“粒子在空间某一点的动量”是没有意义的．因此不能像求位置和势能那样，用波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 来求动量的平均值：

$$\bar{p} \neq \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\boldsymbol{r})\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \tag{1.2.15}$$

因为 $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$表示在每一个确定的空间位置 $\boldsymbol{r}$ 有相应的确定的动量 $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$. 这是直接违反不确定原理的. 为了得出用 $\psi(\boldsymbol{r})$来计算动量平均值的公式,我们利用动量表象波函数 $\varphi(\boldsymbol{p})$:

$$\begin{aligned}
\bar{p} &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}\varphi(\boldsymbol{p})\mathrm{d}\boldsymbol{p} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right]^* \boldsymbol{p}\varphi(\boldsymbol{p})\mathrm{d}\boldsymbol{p} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\boldsymbol{r}) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left[p\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\right]\varphi(\boldsymbol{p})\mathrm{d}\boldsymbol{p}\mathrm{d}\boldsymbol{r} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\boldsymbol{r}) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left[(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\right]\varphi(\boldsymbol{p})\mathrm{d}\boldsymbol{p}\mathrm{d}\boldsymbol{r} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\left[\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\boldsymbol{p}) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{p}\right]\mathrm{d}\boldsymbol{r} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}.
\end{aligned} \tag{1.2.16}$$

这样,我们就得到了用波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$来计算动量平均值的公式. 和(1.2.15) 比较,实际上用$(-\mathrm{i}\hbar\nabla)$代替了 $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$,它表示对波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$施行某种数学运算,记为:

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla, \tag{1.2.17}$$

称为动量算符(momentum operator). 这样力学量的平均值可以通过相应的算符来计算.

力学量算符

在量子力学中,描述物理系统的每一个力学量(dynamical variable),都对应一个算符. 量子态用波函数来描述,力学量用算符来表示,凡是与经典力学量对应的力学量,其相应的算符,都可以由坐标和动量算符得到:

$$\boldsymbol{r} \to \hat{\boldsymbol{r}}, \tag{1.2.18}$$

$$\boldsymbol{p} \to \hat{\boldsymbol{p}} \to -\mathrm{i}\hbar\nabla. \tag{1.2.19}$$

只与坐标有关的力学量,例如势能 $U(\boldsymbol{r})$和作用力 $f(\boldsymbol{r}) = -\nabla U(\boldsymbol{r})$,它们在量子力学中所对应的算符仍然是坐标函数,形式不变. 凡是与

动量有关的力学量，它们在量子力学中所对应的算符，可以由动量算符得到.例如动能算符：

$$T=\frac{p^2}{2m}\rightarrow\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \tag{1.2.20}$$

和坐标与动量都有关的力学量，例如角动量，其算符为：

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}\rightarrow\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\nabla, \tag{1.2.21}$$

角动量算符在直角坐标系中的三个分量为：

$$\begin{cases}\hat{L}_x=y\hat{p}_z-z\hat{p}_y=-\mathrm{i}\hbar\left(y\dfrac{\partial}{\partial z}-z\dfrac{\partial}{\partial y}\right)\\ \hat{L}_y=z\hat{p}_x-x\hat{p}_z=-\mathrm{i}\hbar\left(z\dfrac{\partial}{\partial x}-x\dfrac{\partial}{\partial z}\right),\\ \hat{L}_z=x\hat{p}_y-y\hat{p}_x=-\mathrm{i}\hbar\left(x\dfrac{\partial}{\partial y}-y\dfrac{\partial}{\partial x}\right)\end{cases} \tag{1.2.22}$$

用球坐标表示为：

$$\begin{cases}\hat{L}_x=\mathrm{i}\hbar\left(\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{L}_y=\mathrm{i}\hbar\left(-\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right).\\ \hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\end{cases} \tag{1.2.23}$$

角动量平方算符为：

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\right]. \tag{1.2.24}$$

在势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动的粒子，与经典哈密顿量对应的算符为哈密顿算符(Hamilton operator)：

$$H=T+V(\boldsymbol{r})\rightarrow\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r}). \tag{1.2.25}$$

算符的运算和对易

保持波函数不变的算符称为单位算符 I：

$$I\psi=\psi. \tag{1.2.26}$$

对于任意的波函数 ψ，如果

$$\hat{A}\psi=\hat{B}\psi, \tag{1.2.27}$$

则称这两个算符相等：

$$\hat{A} = \hat{B}. \tag{1.2.28}$$

两个算符之和定义为

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi, \tag{1.2.29}$$

两个算符之积定义为

$$(\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi), \tag{1.2.30}$$

定义对易式：

$$[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \tag{1.2.31}$$

如果 $[\hat{A},\hat{B}] = 0$，则称算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易(commutation)，如果 $[\hat{A},\hat{B}] \neq 0$，则称算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 不对易.

本征值和本征方程

一般说与力学量相应的算符是 $\hat{A}$，与这个力学量算符相应的波函数是 ψ_A，那末它的本征方程(eigen equation)为

$$\hat{A}\psi_A = A\psi_A, \tag{1.2.32}$$

解这个本征方程可以得到算符 $\hat{A}$ 的一套本征函数(eigen function) ψ_A 和相应的本征值 A. 若一个本征值(eigen value)A_i 只对应一个本征函数，则称这个本征值是非简并的；若一个本征值 A_i 对应着 m 个本征函数，则这个本征值是简并(degeneracy)的，其简并度是 m.

力学量的平均值

在量子力学中，粒子在三维坐标空间的任何一个力学量 A 的平均值为：

$$\overline{A} = \int \psi^* \hat{A}\psi \mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{1.2.33}$$

力学量 A 一般不具有确定的数值，如果 ψ_{A_1} 属于本征值 A_1 的本征函数，则力学量 A 具有确定值 A_1，算符本征函数所描述的态是算符所表示的力学量具有确定值的态. 此确定值就是本征函数对应的本征值：

$$\int \psi_{A_1}^* \hat{A}\psi_{A_1} \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int \psi_{A_1}^* A_1 \psi_{A_1} \mathrm{d}\boldsymbol{r} = A_1 \int \psi_{A_1}^* \psi_{A_1} \mathrm{d}\boldsymbol{r} = A_1. \tag{1.2.34}$$

对能量算符来说，如果它有几个本征值，那么系统的平均能量等于这些能量本征值的加权求和.

例题 1.2.4　已知限制在 $-a < x < a$ 范围内的质量为 m 的粒子的归一化波函数为：

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{1}{a}}\cos\left(\dfrac{n\pi x}{2a}\right), & -a<x<a,\\ 0, & x\leqslant -a, x\geqslant a,\end{cases}$$

计算其动量和动能平均值.此波函数是否是动量的本征函数?是否是动能的本征函数?如果是,本征值是何值?

解 动量算符为 $\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$,动量平均值为:

$$\begin{aligned}\bar{p}&=-\mathrm{i}\hbar\int_{-a}^{a}\psi_n^*(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\mathrm{d}x\\&=-\mathrm{i}\frac{\hbar}{a}\int_{-a}^{a}\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)\frac{\partial}{\partial x}\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)\mathrm{d}x\\&=\mathrm{i}\frac{\hbar}{a}\left(\frac{n\pi}{2a}\right)\int_{-a}^{a}\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)\sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)\mathrm{d}x=0.\end{aligned}$$

动能算符为 $\dfrac{\hat{p}^2}{2m}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$,动能平均值为:

$$\begin{aligned}\overline{\frac{p^2}{2m}}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\psi_n^*(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\mathrm{d}x\\&=-\frac{\hbar^2}{2ma}\int_{-a}^{a}\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)\mathrm{d}x\\&=\frac{\hbar^2}{2ma}\left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2\int_{-a}^{a}\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2n^2\pi^2}{8ma^2}.\end{aligned}$$

对于动量算符:

$$\begin{aligned}\hat{p}\psi_n(x)&=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_n(x)=-\mathrm{i}\hbar\sqrt{\frac{1}{a}}\frac{\partial}{\partial x}\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)\\&=\mathrm{i}\hbar\sqrt{\frac{1}{a}}\frac{n\pi}{2a}\sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right),\end{aligned}$$

显然不是本征函数.

对于动能算符:

$$\begin{aligned}\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi_n(x)&=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_n(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{1}{a}}\frac{\partial}{\partial x}\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)\\&=\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{1}{a}}\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)^2\cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)=\frac{\hbar^2n^2\pi^2}{8ma^2}\psi_n(x),\end{aligned}$$

显然是本征函数. 本征值为$\frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{8ma^2}$,等于其平均值.

1.2.5 全同粒子和泡利不相容原理

全同粒子

静止质量、电荷和自旋等内禀属性完全相同的微观粒子称为全同粒子(identical particles). 例如所有的电子都是全同粒子,所有的质子也都是全同粒子. 全同粒子系是由同类粒子组成的多粒子系,它们的基本特征是任何可观测量,特别是哈密顿量,对于任何两个粒子的交换是不变的. 这称为全同粒子系的交换对称性.

全同粒子系波函数的交换对称性

氦原子中有两个电子,如果在空间某处观测到一个电子,则完全不能判断它究竟是氦原子中两个电子的哪一个. 对于全同粒子系,任何两个粒子交换一下,按照全同粒子系的交换对称性,一切观测的结果都不会因此而改变. 所以该体系的量子态是不变的. 这就要求波函数对于粒子的交换具有一定的对称性. 假设一个全同粒子系由 N 个粒子组成,其波函数为:

$$\psi(q_1,q_2,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N), \tag{1.2.35}$$

其中 q_i 表示第 i 个粒子的全部坐标. 用 P_{ij}表示对第 i 个粒子和第 j 个粒子的全部坐标的交换:

$$P_{ij}\psi(q_1,q_2,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_N) = \psi(q_1,q_2,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_N), \tag{1.2.36}$$

由于这两个波函数所描述的是同一个量子态,它们最多只能相差一个位相因子 C:

$$P_{ij}\psi = C\psi, \tag{1.2.37}$$

因此交换算符 P_{ij}的本征值为 C. 用 P_{ij}运算两次:

$$P_{ij}^2\psi = CP_{ij}\psi = C^2\psi, \tag{1.2.38}$$

显然有:

$$C^2 = 1,\quad C = \pm 1. \tag{1.2.39}$$

交换算符 P_{ij}只有两个本征值. 因此全同粒子系的波函数必须满足下列两种情况之一:一是任意交换两个粒子后不变,称为对称波

函数；一是任意交换两个粒子后变号，称为反对称波函数.

玻色子和费米子

对于每一类全同粒子，它们的多粒子系波函数的交换对称性是完全确定的，与粒子的自旋有确定的联系：凡是自旋为$\hbar$的整数倍的粒子($s=0,1,2,\cdots$)，其全同粒子系的波函数是对称的，例如光子($s=1$)、π 介子($s=0$)等，它们遵从玻色统计，称为玻色子(boson)；凡是自旋为$\hbar$的半奇数倍的粒子($s=1/2,3/2,\cdots$)，其全同粒子系的波函数是反对称的，例如电子($s=1/2$)、质子和中子($s=1/2$)等，它们遵从费米统计，称为费米子(fermion). 由偶数个费米子组成的复合粒子为玻色子，由奇数个费米子组成的复合粒子仍然为费米子.

两个全同粒子的波函数

考虑由两个无相互作用的全同粒子组成的体系，$\phi_k(q)$为相应的归一化的单粒子的波函数. q 表示粒子的全部坐标，k 代表足以描述该粒子的一组完全的量子数. ε_k 为相应的单粒子的能量. 如果一个粒子处于 ϕ_{k_1}态，另一个粒子处于 ϕ_{k_2}态，体系的波函数为：

$$\phi_{k_1}(q_1)\phi_{k_2}(q_2) \quad 和 \quad \phi_{k_1}(q_2)\phi_{k_2}(q_1), \tag{1.2.40}$$

所对应的能量都是：

$$E=\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_2}. \tag{1.2.41}$$

如果两个粒子所处的状态不同，$k_1\neq k_2$，则体系的上述两个波函数既不是对称波函数，也不是反对称波函数，这样波函数不能满足全同粒子系波函数对称性的要求. 然而，上述两个波函数的和或差，可以组成对称波函数或反对称波函数. 对于玻色子，要求波函数对于交换是对称的，其归一化波函数为：

$$\psi^{s}_{k_1k_2}(q_1,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_{k_1}(q_1)\phi_{k_2}(q_2)+\phi_{k_1}(q_2)\phi_{k_2}(q_1)\right], \tag{1.2.42}$$

对于费米子，要求波函数对于交换是反对称的，其归一化波函数为：

$$\psi^{a}_{k_1k_2}(q_1,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_{k_1}(q_1)\phi_{k_2}(q_2)-\phi_{k_1}(q_2)\phi_{k_2}(q_1)\right]. \tag{1.2.43}$$

泡利不相容原理

从由两个费米子组成的体系的反对称波函数可以看出，如果两个全同的费米子处于同一个单粒子态，即 $k_1=k_2$，则体系的反对称波

函数 $\psi^a=0$，这样的状态是不存在的. 即在一个全同粒子系中，不可能有两个全同的费米子处于同一个单粒子态. 这就是著名的泡利不相容原理(Pauli's exclusion principle)①. 这个结论可以推广到由 N 个费米子组成的体系. 显然，N 个玻色子组成的体系不受泡利不相容原理的限制. 泡利因此获得了 1954 年诺贝尔物理学奖.

习　题

1.2.1　试用不确定关系解释电子不能落入原子核内，从而说明原子是稳定的.

1.2.2　利用不确定关系，说明束缚微观粒子零点动能不可能为零.

1.2.3　一个光子显微镜用来测量一个原子中电子的位置在 12 pm 的精度内，求该电子动量的不确定度.

1.2.4　一个处于激发态的原子核辐射 γ 射线返回到它的基态，假定在 1.32 MeV激发态的平均寿命为 8.7 ps，求相应辐射谱线的自然宽度. 以 eV 为单位.

1.2.5　一个原子在一个激发态的寿命为 12 ns，在另一个激发态的寿命为 23 ns，求在这两个激发态间跃迁的谱线的自然宽度. 以 eV 为单位.

1.3　薛定谔方程

1.3.1　薛定谔方程

普朗克认为薛定谔方程奠定了近代量子力学的基础，就像牛顿、拉格朗日和哈密顿创立的方程在经典力学中所起的作用一样；玻尔称波动力学简单明了，大大超过以前的一切形式，代表着量子力学的巨大进步.

薛定谔方程

微观粒子的波函数满足薛定谔方程：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r},t)\right)\psi$$

① W. Pauli, *Zeit. Physik*, **31**(1925)765.

或

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi. \tag{1.3.1}$$

它描述一个质量为 m 的微观粒子在势场$V(\boldsymbol{r},t)$作用下，波函数 ψ 所满足的非相对论性的方程，这个方程不是从理论上推导出来的，也不像经验规律牛顿方程，只能看作是基本假设. 它的正确性由其推导的结果和实验相符而确定.

定态薛定谔方程

若 $V = V(\boldsymbol{r})$，与时间无关，考虑方程的一个特解：

$$\psi(x,y,z,t) = u(x,y,z)f(t), \tag{1.3.2}$$

方程的通解可以表示为许多特解之和. 分离变量有

$$\frac{1}{u}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 u + Vu\right]=\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt}, \tag{1.3.3}$$

等式两边分别为坐标和时间的函数，彼此无关，欲使它们相等，只有都等于一个与坐标和时间无关的常数 E. 方程右侧为：

$$\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} = E, \tag{1.3.4}$$

其解是

$$f = ke^{-\frac{iE}{\hbar}t}. \tag{1.3.5}$$

方程左侧为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2+V\right)u = Eu, \tag{1.3.6}$$

常称为定态薛定谔方程. 只要 V 满足 $V=V(\boldsymbol{r})$，即可按标准条件解出符合物理要求的函数 u. 以 E_n 表示能量算符的第 n 个本征值，u_n 是与 E_n 相应的波函数，则体系的第 n 个定态波函数为

$$\psi_n(x,y,z,t) = u_n(x,y,z)e^{-\frac{iE_n}{\hbar}t}, \tag{1.3.7}$$

含时薛定谔方程的一般解，可以写成这些定态波函数的线性叠加：

$$\psi(x,y,z,t) = \sum_x C_n u_n(x,y,z)e^{-\frac{iE_n}{\hbar}t}. \tag{1.3.8}$$

多数情况下，只解定态薛定谔方程. 通常仍然用 $\psi(x,y,z)$代替 $u(x,y,z)$表示定态波函数，用哈密顿算符表示，定态的薛定谔方程可写为

$$\hat{H}\psi = E\psi. \tag{1.3.9}$$

多粒子体系的薛定谔方程

若质量分别为 $m_i(i=1,2,\cdots,N)$,体系的波函数记为 $\psi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N,t)$,粒子间的相互作用能为 $V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N)$,则 N 个粒子组成体系的总哈密顿量为

$$H \to -\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2+V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N), \qquad (1.3.10)$$

含时的薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N,t)=\left[-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2+V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N)\right]\cdot\psi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N,t), \qquad (1.3.11)$$

定态的薛定谔方程为

$$\left[-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2+V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N)\right]\psi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N)=E\psi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N). \qquad (1.3.12)$$

1.3.2 一维无限深势阱

考虑在一维空间中运动的粒子,它的势能在一定区域内为零,而在此区域以外为无穷大.即

$$\begin{cases}U(x)=0, & |x|<a,\\ U(x)=\infty, & |x|>a,\end{cases} \qquad (1.3.13)$$

这种势称为一维无限深势阱(potential well).

在势阱内 $|x|<a$,粒子满足的定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=E\psi,$$

设 $k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$,则

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=-k^2\psi, \qquad (1.3.14)$$

其通解为

$$\psi=A\cos kx+B\sin kx, \qquad (1.3.15)$$

A 和 B 为待定常数.因为势阱壁无限高,粒子不能透过势阱壁.按照

波函数的统计诠释，要求在势阱壁和势阱外波函数为零.由波函数的连续性可得在边界上 $|x|=a$，波函数必须为零 $\psi=0$. 由此得

$$\begin{cases} A\cos ka + B\sin ka = 0, & x = a, \\ A\cos ka - B\sin ka = 0, & x = -a, \end{cases} \tag{1.3.16}$$

A 和 B 不能同时为零：

$$\begin{cases} A\cos ka = 0, \\ B\sin ka = 0, \end{cases} \tag{1.3.17}$$

有两组解：

$$B = 0, A \neq 0, \cos ka = 0 \quad 和 \quad A = 0, B \neq 0, \sin ka = 0. \tag{1.3.18}$$

由此可得

$$ka = \frac{n}{2}\pi, \quad n = 0,1,2,3,\cdots, \tag{1.3.19}$$

考虑到 $ka=0$ 时波函数为零，没有物理意义.因此粒子的能量为

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8ma^2}, \quad n = 1,2,3,\cdots, \tag{1.3.20}$$

对应于量子数 n 的全部可能值，有无限多个能量值，它们组成粒子的分立能级.

当 $B=0, A\neq 0$ 时，波函数具有偶宇称：

$$\psi_1 = A\cos \frac{n\pi}{2a}x, \quad n = 1,3,5,\cdots; \tag{1.3.21}$$

当 $A=0, B\neq 0$ 时，波函数具有奇宇称：

$$\psi_2 = B\sin \frac{n\pi}{2a}x, \quad n = 2,4,6,\cdots. \tag{1.3.22}$$

1.3.3 一维谐振子

任何体系的小振动，例如分子的振动、晶格上原子的振动、原子核表面振动和辐射场的振动等，常常可以分解为若干彼此独立的一维谐振子(harmonic oscillator).一维谐振子还常常作为复杂运动的初步近似，因此一维谐振子的研究非常重要.设一个质量为 m 物体所受的力与它的位移 x 成正比，而方向相反.即 $F=-kx$，k 为描述

简谐力强度的参数，$\omega=\sqrt{k/m}$为经典简谐振子的圆频率，则一维谐振子的势能可以表示为

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2. \tag{1.3.23}$$

一维谐振子定态的薛定谔方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi=E\psi. \tag{1.3.24}$$

粒子只存在束缚态，即当$|x|\to\infty$时，$\psi\to0$. 这不是常系数微分方程，但是它仍然是可以精确求解的. 这里只给出结果：

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots. \tag{1.3.25}$$

这表明谐振子的能量是量子化的，能级是均匀分布的，相邻能级间隔为$\hbar\omega$. 一维谐振子的基态能量不为零，为$\frac{1}{2}\hbar\omega$，称为零点能. 这是一种量子效应，是微观粒子波粒二象性的表现，能量为零、“静止”的波是不存在的. 谐振子的波函数为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{2^n\sqrt{\pi}\,n!}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\mathrm{H}_n(\alpha x), \tag{1.3.26}$$

其中

$$\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \tag{1.3.27}$$

$\mathrm{H}_n(\alpha x)$是厄米多项式.

1.3.4 隧道效应

具有一定能量E的粒子，沿x轴正方向射向方势垒，

$$V(x)=\begin{cases}V_0, & 0<x<a,\\ 0, & x<0,x>a.\end{cases} \tag{1.3.28}$$

按照经典力学，若$E<V_0$粒子不能进入势垒，将全部被弹回去；但从量子力学的观点来看，考虑到粒子的波动性，问题将与波穿透一层介质相似，有一部分波穿过，一部分波被反射回来. 因此，按波函数的统计诠释，粒子有一定的几率穿过势垒. 粒子能穿过比它动能更高的势

垒，称为量子力学的隧道效应(tunnel effect).

在势垒内部($0<x<a$)定态薛定谔方程为

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi - k^2\psi = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \qquad (1.3.29)$$

在势垒之外($x<0, x>a$)，定态薛定谔方程为

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0, \qquad (1.3.30)$$

它的两个线性无关解为

$$\psi \sim e^{\pm ikx}, \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \qquad (1.3.31)$$

在 $x<0$ 区域中，既有入射波，也有反射波. 但在 $x>a$ 区域中，只能有透射波：

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Pe^{-ikx}, & x < 0, \\ Se^{ikx}, & x > a, \end{cases} \qquad (1.3.32)$$

取入射波 $\psi_{in}=e^{ikx}$，则反射波为 $\psi_r=Pe^{-ikx}$，透射波为$\psi_t=Se^{ikx}$. 按几率流密度公式可以计算：入射流密度、反射流密度和透射流密度分别为 ν, $|P|^2\nu$ 和 $|S|^2\nu$. 因此反射系数 R 和透射系数 T 分别为

$$R = |P|^2; \quad T = |S|^2, \quad R + T = 1. \qquad (1.3.33)$$

当 $ka\gg1$ 时，可以得到：

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}. \qquad (1.3.34)$$

1.3.5 扫描隧道显微镜

隧道效应对于势垒高度和宽度的变化十分敏感，根据这一原理，G. Binnig 和 H. Rohrer 于 1982 年制成了扫描隧道显微镜(scanning tunneling microscope). 用一金属探针在被测的金属表面上方相距约 10 Å 处平行移动进行扫描，于是探针/空气隙/金属表面就构成了一个电子隧道体系. 加一微小电压，从隧道电流的变化，就可以分辨出金属表面原子结构的细微特征. 横向分辨率达 1 Å，纵向分辨率达 0.01 Å，比电子显微镜高得多. G. Binnig 和 H. Rohrer 和第一台电子显微镜的设计者 E. Ruska 一起获得了 1986 年诺贝尔物理学奖.

在外加偏压 V 远小于矩形隧道势垒高度即金属材料的平均功函数 ϕ 时，隧道电流密度为：

$$J = \frac{3}{4}\frac{\sqrt{2m\phi}}{a}\left(\frac{e}{h}\right)^2 V\mathrm{e}^{-2\frac{\sqrt{2m\phi}}{\hbar}a}. \tag{1.3.35}$$

1.3.6 微扰理论

非简并微扰(nondegenerate perturbation)

设体系的哈密顿量 H 不显含时间 t,能量本征方程为：$H\psi=E\psi$. E 为能量本征值. 这种体系的能量本征值问题,除少数体系外,往往不能严格求解. 但如果 H 可以分为两部分：$H=H_0+H'=H_0+\lambda W$. 其中 λ 往往是描述某种作用强度的参数,$|\lambda|\ll 1$ 是一个小量,$H'=\lambda W$ 称为微扰. 如果 H_0 的本征值和本征函数已知：

$$H_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}, \tag{1.3.36}$$

就可以在此基础上,将 H' 的影响逐级考虑进去. 求得本征方程的逐级近似解.

设

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \cdots, \tag{1.3.37}$$

$$\psi = \psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \lambda^2\psi^{(2)} + \cdots, \tag{1.3.38}$$

代入能量本征方程,比较方程两边 λ 的同次幂项,可以得到各级近似的方程：

$$\begin{aligned}
&\lambda^0\text{：} H_0\psi^{(0)} = E^{(0)}\psi^{(0)},\\
&\lambda^1\text{：} H_0\psi^{(1)} + W\psi^{(0)} = E^{(0)}\psi^{(1)} + E^{(1)}\psi^{(0)},\\
&\lambda^2\text{：} H_0\psi^{(2)} + W\psi^{(1)} = E^{(0)}\psi^{(2)} + E^{(1)}\psi^{(1)} + E^{(2)}\psi^{(0)},\\
&\cdots\cdots
\end{aligned} \tag{1.3.39}$$

假设不考虑微扰时,体系处于某非简并能级 $E_k^{(0)}$,即

$$E^{(0)} = E_k^{(0)}, \tag{1.3.40}$$

相应的能量本征函数是完全确定的,即

$$\psi^{(0)} = \psi_k^{(0)}, \tag{1.3.41}$$

以下逐级考虑微扰对此非简并态的影响. 先考虑一级近似：令

$$\psi^{(1)} = \sum_n a_n^{(1)}\psi_n^{(0)}, \tag{1.3.42}$$

考虑 λ 一次幂的方程：

$$\sum_n a_n^{(1)} E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} + W\psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \sum_n a_n^{(1)} \psi_n^{(0)} + E^{(1)} \psi_k^{(0)}, \tag{1.3.43}$$

两边左乘 $\psi_m^{(0)*}$，积分，利用 H_0 本征函数的正交归一性，得

$$a_m^{(1)} E_m^{(0)} + W_{mk} = E_k^{(0)} a_m^{(1)} + E^{(1)} \delta_{mk}, \tag{1.3.44}$$

式中

$$W_{mk} = \int \psi_m^{(0)*} W \psi_k^{(0)} \mathrm{d}\tau, \tag{1.3.45}$$

当 $m=k$ 时，得

$$E^{(1)} = W_{kk}, \tag{1.3.46}$$

$\lambda E^{(1)}$ 是能量的一级修正，它是微扰在零级波函数下的平均值. 当 $m \neq k$ 时，可以证明 $a_k^{(1)}$ 可以取为零. 因此，在一级近似下，能量的本征值和本征函数为

$$a_m^{(1)} = \frac{W_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}, \tag{1.3.47}$$

$$E_k = E_k^{(0)} + \lambda W_{kk} = E_k^{(0)} + H'_{kk}, \tag{1.3.48}$$

$$\psi_k = \psi_k^{(0)} + \sum_n{}' \frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_n^{(0)}. \tag{1.3.49}$$

求和号右上角带撇表示 $n=k$ 项必须抛弃.

二级近似令

$$\psi^{(2)} = \sum_n a_n^{(2)} \psi_n^{(0)}, \tag{1.3.50}$$

代入 λ^2 的方程，并利用一级近似解得

$$\begin{aligned} &\sum_n a_n^{(2)} E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} + W \sum_n{}' a_n^{(1)} \psi_n^{(0)} \\ &\quad = E_k^{(0)} \sum_n a_n^{(2)} \psi_n^{(0)} + W_{kk} \sum_n a_n^{(1)} \psi_n^{(0)} + E^{(2)} \psi_k^{(0)}, \end{aligned} \tag{1.3.51}$$

两边左乘 $\psi_m^{(0)*}$，积分，利用 H_0 本征函数的正交归一性，得

$$a_m^{(2)} E_m^{(0)} + \sum_n{}' a_n^{(1)} W_{mn} = E_k^{(0)} a_m^{(2)} + W_{kk} a_m^{(1)} + E^{(2)} \delta_{mk}, \tag{1.3.52}$$

对于 $m=k$,上式给出

$$E^{(2)} = \sum_n{}' a_n^{(1)} W_{kn} = \sum_n{}' \frac{|W_{nk}|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}, \qquad (1.3.53)$$

所以在准确到二级近似下,能量本征值为

$$E_k = E_k^{(0)} + H'_{kk} + \sum_n{}' \frac{|H'_{nk}|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}. \qquad (1.3.54)$$

微扰对波函数的修正,通常计算到一级近似,对能量的修正则计算到二级近似.

例题 1.3.1 一维谐振子,其能量算符为

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

假设此谐振子受到微扰作用

$$H' = \frac{\lambda}{2}m\omega^2 x^2, \quad |\lambda| \ll 1,$$

试求各能级的一、二级微扰修正.

解 利用厄米多项式的递推关系,可以得到

$$x\psi_n(x) = \frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x)\right],$$

$$x^2\psi_n(x) = \frac{1}{2\alpha^2}\left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}(x) + (2n+1)\psi_n(x) + \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}(x)\right],$$

其中 $\alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$. 因此矩阵元

$$x_{m,n} = \frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right],$$

$$x_{m,n}^2 = \frac{1}{2\alpha^2}\left[\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + (2n+1)\delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2}\right],$$

$$H'_{nn} = \frac{\lambda}{2}m\omega^2\sum_{m=n} x_{m,n}^2 = \frac{\lambda}{2}m\omega^2\frac{2n+1}{2\alpha^2} = \frac{\lambda}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{\lambda}{2}E_n^{(0)}.$$

能量的一级修正为

$$\lambda E_n^{(1)} = H'_{nn} = \frac{\lambda}{2}E_n^{(0)},$$

$$H'_{n,n+2} = H'_{n+2,n} = \frac{\lambda}{2}m\omega^2\frac{1}{2\alpha^2}\sqrt{(n+1)(n+2)}$$

$$= \frac{\lambda}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\hbar\omega,$$

$$H'_{n,n-2} = H'_{n-2,n} = \frac{\lambda}{2}m\omega^2\frac{1}{2\alpha^2}\sqrt{n(n-1)}$$

$$= \frac{\lambda}{4}\sqrt{n(n-1)}\,\hbar\omega,$$

能量的二级修正为

$$\lambda^2 E^{(2)} = \sum_n{}' \frac{|H'_{nk}|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} = \frac{H'^2_{n,n-2} - H'^2_{n,n+2}}{2\hbar\omega} = \frac{\lambda^2}{8}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega.$$

简并微扰(degenerate perturbation)

当零级近似能级是简并态时,上述微扰论是不适用的. 首先遇到的困难是:当零级能量给定后,对应的零级波函数不惟一. 体系能级的简并性与体系的对称性密切相关. 考虑微扰后,体系的某种对称性被破坏,能级可能分裂,简并将被部分或全部解除.

假设 $E_n^{(0)}$ 是 k 重简并的,属于 H_0 的本征值 $E_n^{(0)}$ 有 k 个本征函数,将零级近似波函数写成这 k 个波函数的线性组合:

$$\psi_n^{(0)} = \sum_{i=1}^{k} c_i^{(0)}\phi_i^{(0)}, \tag{1.3.55}$$

将零级近似波函数代入 λ^1 的方程 $H_0\psi^{(1)} + W\psi^{(0)} = E^{(0)}\psi^{(1)} + E^{(1)}\psi^{(0)}$ 得

$$(H_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)}\sum_{i=1}^{k} c_i^{(0)}\phi_i^{(0)} - \sum_{i=1}^{k} c_i^{(0)} W\phi_i^{(0)}. \tag{1.3.56}$$

以 $\phi_l^{(0)*}$ 左乘上式两边,积分,由于 H_0 是厄米算符,$E_n^{(0)}$ 是实数,得

$$\int\phi_l^{(0)*}(H_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(1)}\mathrm{d}\tau = \int[(H_0 - E_n^{(0)})\phi_l^{(0)}]^*\psi_n^{(1)}\mathrm{d}\tau = 0, \tag{1.3.57}$$

$$\sum_{i=1}^{k}(H_{li} - \lambda E_n^{(1)}\delta_{li})c_i^{(0)} = 0, \quad l = 1,2,\cdots,k, \tag{1.3.58}$$

式中

$$H_{li}=\int\phi_l^{(0)*}H'\phi_i^{(0)}\mathrm{d}\tau,\tag{1.3.59}$$

这是以系数 $c_i^{(0)}$ 为未知量的线性齐次方程组，它有不全为零的解的条件是其系数行列式等于零

$$\det|H_{li}-\lambda E_n^{(1)}\delta_{li}|=0.\tag{1.3.60}$$

解此久期方程可得能量的一级修正 $E_n^{(1)}$ 的 k 个根，若 $E_n^{(1)}$ 的 k 个根都不相等，则一级微扰可以将 k 重简并完全消除.

例题 1.3.2 设体系的能级 $E_n^{(0)}$ 为二重简并，相应的零级波函数记为 $\varphi_1^{(0)}$ 和 $\varphi_2^{(0)}$. 微扰 $H'=\lambda W$. 求存在微扰时体系的能量.

解 设零级近似波函数为

$$\psi_n^{(0)}=c_1^{(0)}\varphi_1^{(0)}+c_2^{(0)}\varphi_2^{(0)},$$

代入一级近似方程 $H_0\psi^{(1)}+W\psi^{(0)}=E^{(0)}\psi^{(1)}+E^{(1)}\psi^{(0)}$ 后，以 $\varphi_1^{(0)*}$ 左乘上式两边，积分，由于 H_0 是厄米算符，$E_n^{(0)}$ 是实数，得

$$\int\varphi_1^{(0)*}(H_0-E_n^{(0)})\psi_n^{(1)}\mathrm{d}\tau=\int\left[(H_0-E_n^{(0)})\varphi_1^{(0)}\right]^*\psi_n^{(1)}\mathrm{d}\tau=0,$$

$$\left[E^{(1)}-\int\varphi_1^{(0)*}W\varphi_1^{(0)}\mathrm{d}\tau\right]c_1^{(0)}+\int\varphi_1^{(0)*}W\varphi_2^{(0)}\mathrm{d}\tau c_2^{(0)}=0,\tag{1}$$

同样以 $\varphi_2^{(0)*}$ 左乘上式两边，积分，由于 H_0 是厄米算符，$E_n^{(0)}$ 是实数，得

$$\int\varphi_2^{(0)*}(H_0-E_n^{(0)})\psi_n^{(1)}\mathrm{d}\tau=\int\left[(H_0-E_n^{(0)})\varphi_2^{(0)}\right]^*\psi_n^{(1)}\mathrm{d}\tau=0,$$

$$\left[E^{(1)}-\int\varphi_2^{(0)*}W\varphi_2^{(0)}\mathrm{d}\tau\right]c_2^{(0)}+\int\varphi_2^{(0)*}W\varphi_1^{(0)}\mathrm{d}\tau c_1^{(0)}=0,\tag{2}$$

(1)和(2)是 $c_i^{(0)}$ 满足的线性齐次方程组，不恒为零的必要条件为

$$\begin{vmatrix}\left[\lambda E^{(1)}-\int\varphi_1^{(0)*}\lambda W\varphi_1^{(0)}\mathrm{d}\tau\right] & \int\varphi_1^{(0)*}\lambda W\varphi_2^{(0)}\mathrm{d}\tau\\ \int\varphi_2^{(0)*}\lambda W\varphi_1^{(0)}\mathrm{d}\tau & \left[\lambda E^{(1)}-\int\varphi_2^{(0)*}\lambda W\varphi_2^{(0)}\mathrm{d}\tau\right]\end{vmatrix}=0.$$

令微扰矩阵元 $H_{ij}=\int\varphi_i^{(0)*}\lambda W\varphi_j^{(0)}\mathrm{d}\tau$，久期方程化为

$$\begin{vmatrix}\lambda E^{(1)}-H_{11} & H_{12}\\ H_{21} & \lambda E^{(1)}-H_{22}\end{vmatrix}=0,$$

这是关于能量一级修正 $\lambda E^{(1)}$ 的一元二次方程. 用求根公式可得 $\lambda E^{(1)}$ 的两个根.

习　题

1.3.1　在发现中子之前，曾认为原子核是由 A 个质子和 $(A-Z)$ 个电子组成的，用无限高方势阱中粒子的零点能公式

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2},$$

估算原子核中质子和电子的零点能.

1.3.2　求一维无限深势阱中粒子的归一化波函数.

1.3.3　一微观粒子，沿 x 方向运动，其波函数为

$$\psi(x) = \frac{A}{1+\mathrm{i}x},$$

(1) 将此波函数归一化；(2) 求出粒子坐标的几率分布函数；(3) 在何处找到粒子的几率最大？

1.3.4　一个能量为 2 eV 的电子，穿过高度为 5 eV 的势垒，试用式(1.3.34)估算势垒宽度分别为 5 Å 和 8 Å 时的透射系数.

1.3.5　一维谐振子，其能量算符为：

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

假设此谐振子受到电场 E 的微扰作用：

$$H' = -qEx,$$

利用公式 $x\psi_n(x) = \frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x)\right]$ 求各能级的一、二级微扰修正.

1.4　氢　原　子

1.4.1　电子运动的薛定谔方程

氢原子的运动是包括电子和核的两体的运动. 在有心力场问题中，两体相互作用势为 $U(\boldsymbol{r}_e - \boldsymbol{r}_p)$，氢原子的薛定谔方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p}\nabla_p^2 + U(\boldsymbol{r}_e - \boldsymbol{r}_p)\right]\psi(\boldsymbol{r}_e, \boldsymbol{r}_p) = E_t\psi(\boldsymbol{r}_e, \boldsymbol{r}_p),$$

(1.4.1)

其中 m_e, m_p 分别为电子和原子核的质量，E_t 为体系的总能量和. 引进质心坐标(coordinates of the center of mass) $\boldsymbol{R}$ 和相对坐标(relative coordinates) $\boldsymbol{r}$:

$$\boldsymbol{R} = \frac{m_e \boldsymbol{r}_e + m_p \boldsymbol{r}_p}{m_e + m_p}; \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_e - \boldsymbol{r}_p. \tag{1.4.2}$$

可以证明[①]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p}\nabla_p^2 = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2, \tag{1.4.3}$$

其中

$$M = m_e + m_p, \quad \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}. \tag{1.4.4}$$

氢原子的薛定谔方程化为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + U(\boldsymbol{r})\right]\psi = E_t\psi. \tag{1.4.5}$$

用分离变量法求解，设

$$\psi = \phi(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r}), \tag{1.4.6}$$

代入方程(1.4.5)，可得两个变量分离的方程. 一个是描述质心运动状态的波函数 $\phi(\boldsymbol{R})$ 所满足的方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\phi(\boldsymbol{R}) = (E_t - E)\phi(\boldsymbol{R}), \tag{1.4.7}$$

E 为两粒子相对运动的能量. 另一个是电子相对于核运动的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 所满足的薛定谔方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + U(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}), \tag{1.4.8}$$

$U(\boldsymbol{r}) = -\dfrac{1}{4\pi\epsilon_0}\dfrac{Ze^2}{r}$ 为体系的势能. 由于 $m_e/m_p = 1/1836$，因此 $M \approx m_p$，$\phi(\boldsymbol{R})$ 大体上描述原子核的运动；$\mu \approx m_e$，$\psi(\boldsymbol{r})$ 大体上描述电子相对于原子核的运动.

---

① 周世勋，量子力学教程，人民教育出版社，1979.

1.4.2 分离变量①

用球坐标(spherical coordinates)下的拉普拉斯算符写出电子的动能算符:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2\mu r^2}\hat{L}^2, \qquad (1.4.9)$$

其中

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right]. \qquad (1.4.10)$$

算符 $\hat{L}^2$ 是角动量平方算符,只包含对角度的求导. 中心势只依赖半径坐标 r,所以有理由把试探波函数中径向函数和角函数分解为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)\mathrm{Y}_{l,m}(\theta,\varphi), \qquad (1.4.11)$$

代入薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right]\psi = E\psi, \qquad (1.4.12)$$

得

$$\frac{1}{R}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)$$
$$= -\frac{1}{\mathrm{Y}}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}}{\partial\varphi^2}\right]. \qquad (1.4.13)$$

这个方程左右两边是不同独立变量的函数,只有都等于同一个常数 λ 时,等式才能成立. 则方程分离成两个独立的方程:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}}{\partial\varphi^2} = -\lambda\mathrm{Y}, \qquad (1.4.14)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) - \frac{\lambda}{r^2}\right]R = 0. \qquad (1.4.15)$$

---

① L. I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill Bookcompany, 1968, p77.

1.4.3 角量子数和磁量子数

方程 (1.4.14) 是角动量平方算符的本征方程. 为使 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 在 θ 变化的整个区域($0\to\pi$)内都有限,必须

$$\lambda = l(l+1),\quad l = 0,1,2,\cdots, \tag{1.4.16}$$

其解为球谐函数(spherical harmonics):

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m N_{lm} P_l^{|m|}(\omega) e^{im\varphi}, \tag{1.4.17}$$

$$m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\cdots,\ \pm l. \tag{1.4.18}$$

其中 $P_l^{|m|}(\omega)$ 是连带的勒让德多项式(the associated Legendre polynomials):

$$P_l^{|m|}(\omega) = \frac{1}{2^l l!}(1-\omega^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|}}{d\omega^{l+|m|}}(\omega^2-1)^l,\quad 其中\ \omega = \cos\theta, \tag{1.4.19}$$

N_{lm} 是归一化常数:

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{4\pi(l+|m|)!}}, \tag{1.4.20}$$

因此 $\hat{L}^2$ 的本征值是 $l(l+1)\hbar^2$,其本征函数为 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{1.4.21}$$

l 称为角量子数或"轨道"角动量量子数. 由于波粒二象性,微观粒子的运动无严格的轨道,只能给出其位置的几率分布. 但是可以求出几率分布的极大值. 这里借用"轨道",只是描述电子在原子核外的运动,与电子的"自旋"相区别. $l=0,1,2,3,4,5,\cdots$ 的态依次称为 s,p,d,f,g,h,…态. 处于这些态上的粒子依次称为 s,p,d,f,g,h,…电子. m 称为轨道磁量子数,表示为 m_l. 对应一个 l 值,m_l 可取 $2l+1$ 个值. 对应 $\hat{L}^2$ 的一个确定的本征值,有 $2l+1$ 个不同的本征函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$. 这种对应于同一本征值有多个本征函数的情况称为简并. 对应于同一本征值的本征函数的数目称为简并度. 图 1.4.1 显示了 $l=1,2,10$ 的 m_l 和 L_z 的取值.

因为:

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{1.4.22}$$

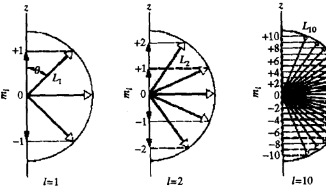


图 1.4.1　轨道角动量矢量及其在 z 轴的投影

即在 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$态中，体系角动量在 z 方向的投影为

$$\hat{L}_z = m\hbar, \tag{1.4.23}$$

这就是玻尔的量子化条件. 下面给出前几个球函数：

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}};$$

$$Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}, Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad Y_{1,-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi};$$

$$Y_{2,2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{2i\varphi}, Y_{2,-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{-2i\varphi},$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1), Y_{2,1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\varphi},$$

$$Y_{2,-1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\varphi}. \tag{1.4.24}$$

1.4.4　主量子数和径向波函数

方程（1.4.15）为径向方程(radial equation). 可以转化为能量的本征方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) + \frac{\lambda\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]R = ER. \tag{1.4.25}$$

当体系能量 $E>0$ 时可取连续值，电子离开核运动到无限远处

(电离). 当体系能量 $E<0$ 时,电子处于束缚态[1], E 只能取分立值. 解此方程可得氢原子能量本征值[2]:

$$E=-\frac{\mu Z^2e^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2}\cdot\frac{1}{n^2},\quad n=1,2,3,4,5,6,\cdots. \qquad (1.4.26)$$

n 称为主量子数,取正整数. 具有相应能量的电子依次称为 K, L, M, N, O, P, …主壳层的电子. 对应于一个 n, l 可以取 $l=0,1,2,\cdots,n-1$ 等共 n 个值;而对应于一个 l, m 还可以取 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$ 等共 $(2l+1)$ 个值;共有 n^2 个不同的波函数,因此电子的第 n 个能级是 n^2 度简并的.

如果认为氢原子核的质量相对于电子的质量来说为无穷大,则电子的折合质量就等于电子的静止质量. 氢原子的能量可以表示为

$$E=-\frac{R_\infty hc}{n^2}, \qquad (1.4.27)$$

其中

$$R_\infty=\frac{2\pi^2me^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2h^3c}=1.097\,373\,1\times10^5\mathrm{cm}^{-1}, \qquad (1.4.28)$$

称为里德伯常数. 有时应用里德伯能量

$$R'_\infty=R_\infty hc=13.605\,598\,1(42)\mathrm{eV}, \qquad (1.4.29)$$

作为原子能量的单位,它是一个物理常数.

电子的径向波函数为

$$R_{nl}(r)=N_{nl}\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}\rho^l\mathrm{L}_{n+1}^{2l+1}(\rho), \qquad (1.4.30)$$

其中连带的拉盖尔多项式(the associated Laguerre polynomials):

$$\mathrm{L}_{n+1}^{2l+1}(\rho)=\sum_{k=0}^{n-l-1}(-1)^{k+2l+1}\frac{[(n+l)!]^2\rho^k}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!k!}, \qquad (1.4.31)$$

N_{nl}是归一化常数,

$$N_{nl}=-\left\{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{\frac{1}{2}}, \qquad (1.4.32)$$

其中

---

① E. Schrödinger, *Ann. Physik* **79**(1926)361

② L. I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill Bookcompany, 1968, p90.

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0}, \quad a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}. \tag{1.4.33}$$

a_0 为氢原子的第一玻尔半径，它正好等于在氢原子中沿径向 r 到 $r+\mathrm{d}r$ 的球壳中发现电子概率最大的半径，等于 0.529 177 249(24)× 10^{-10} m. 下面列出前面几个径向函数：

$$R_{1,0}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2\exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right),$$

$$R_{2,0}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)\exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right),$$

$$R_{2,1}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_0\sqrt{3}}\exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right),$$

$$R_{3,0}(r) = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left[2 - \frac{4Zr}{3a_0} + \frac{4}{27}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right]\exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right),$$

$$R_{3,1}(r) = \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{2}{27\sqrt{3}} - \frac{Zr}{81a_0\sqrt{3}}\right]\frac{Zr}{a_0}\exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right),$$

$$R_{3,2}(r) = \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{81\sqrt{15}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right). \tag{1.4.34}$$

1.4.5 氢原子中电子的几率分布

当氢原子处于 $\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$ 量子态时，电子在空间 (r,θ,φ) 点附近体积元 $\mathrm{d}\tau = r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$ 内出现的几率为：

$$W_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi = |\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)|^2 r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi, \tag{1.4.35}$$

如果只考虑电子的径向分布，可将上式对 θ 从 $0\to\pi$、φ 从 $0\to 2\pi$ 积分，并注意到 $\mathrm{Y}_{l,m}(\theta,\varphi)$ 是已经归一化的，便得到在半径 r 到 $r+\mathrm{d}r$ 的球壳中电子出现的几率：

$$\begin{aligned} W_{n,l}(r)\mathrm{d}r &= \int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} |R_{n,l}(r)\mathrm{Y}_{l,m}(\theta,\varphi)|^2 r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi \\ &= R_{n,l}^2(r)r^2\mathrm{d}r, \end{aligned} \tag{1.4.36}$$

显然 $R_{n,l}^2 r^2$ 为在半径为 r 的球面上电子出现的几率. 图 1.4.2 显示了氢原子 1s、2s 和 3s 电子径向几率分布 $R_{n,l}^2 r^2$ 曲线和灰度图，亮度越

高，电子径向分布的几率越大.

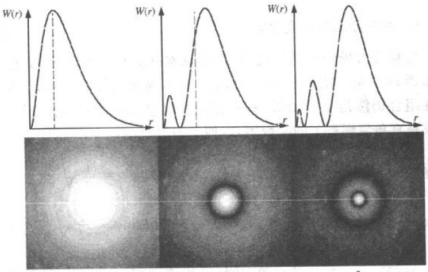


图 1.4.2　氢原子的 1s、2s 和 3s 电子径向几率分布 $R_{n,l}^2 r^2$ 曲线和分布灰度图①

电子在方向(θ,φ)附近立体角 $\mathrm{d}\Omega=\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$ 内出现的几率为：

$$W_{l,m}(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega = |\mathrm{Y}_{l,m}(\theta,\varphi)|^2\mathrm{d}\Omega = N_{l,m}^2\left[\mathrm{P}_l^{|m|}(\cos\theta)\right]^2\mathrm{d}\Omega, \tag{1.4.37}$$

由于$W_{l,m}(\theta,\varphi)$实际上与φ角无关，因此只是θ角的函数. 图1.4.3

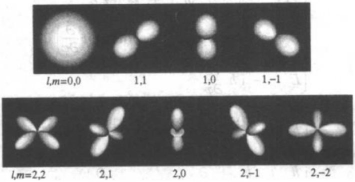


图 1.4.3　s、p、d 态电子的角分布 $\mathrm{Y}_{lm}^2(\theta,\varphi)$.
坐标轴选择：$\theta=45°,\varphi=45°$. ②

---

① 选自北京大学物理系 97 级谢平等同学专题研究报告“氢原子电子云演示”软件.
② 同上.

显示了氢原子 s、p 和 d 电子角向几率分布 $Y_{l,m}^2(\theta,\varphi)$ 灰度图.

1.4.6 简并波函数的实数解

在有心力场中运动的粒子,其能量本征值与磁量子数 m 无关. 例如当 $l=1$ 时,相应于 $m=-1,0,1$ 的 p 波函数是简并的,它们的线性组合仍然是 p 波函数,具有相同的能量. 通常的组合方式使其构成在直角坐标系下的实数解,以便于图形表示:

$$p_x=\sqrt{\frac{1}{2}}(Y_{1,-1}-Y_{1,1})=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sin\theta\cos\varphi=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{x}{r},$$

$$p_y=i\sqrt{\frac{1}{2}}(Y_{1,-1}+Y_{1,1})=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sin\theta\sin\varphi=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{y}{r},$$

$$p_z=Y_{1,0}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{z}{r}. \tag{1.4.38}$$

与此类似,$l=2$ 的 d 函数的实数解 $d_{x^2-y^2},d_{xy},d_{yz},d_{zx},d_{z^2}$ 是由 $Y_{2,0},Y_{2,1},Y_{2,-1},Y_{2,2}$ 和 $Y_{2,-2}$ 线性组合得到的.

例题 1.4.1　*p 函数的实数解 p_x,p_y,p_z 分别是轨道角动量哪个分量算符的本征函数? 本征值是多少?*

解

$$\begin{cases}\hat{L}_x=i\hbar\left(\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{L}_y=i\hbar\left(-\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\ \hat{L}_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\end{cases}$$

$$\begin{aligned}\hat{L}_xp_x&=i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sin\theta\cos\varphi\\&=\frac{i\hbar}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\sin\theta\cos\varphi\\&=\frac{i\hbar}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}(\sin\varphi\cos\theta\cos\varphi-\cos\theta\cos\varphi\sin\varphi)=0,\end{aligned}$$

因此 p_x 是 $\hat{L}_x$ 的本征函数,本征值为零. 可以证明 p_x 不是 $\hat{L}_y$ 和 $\hat{L}_z$

的本征函数.

$$\hat{L}_y p_y = \mathrm{i}\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sin\theta\sin\varphi$$

$$=\mathrm{i}\hbar\sqrt{\frac{3}{\pi}}\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\sin\theta\sin\varphi$$

$$=\mathrm{i}\hbar\sqrt{\frac{3}{\pi}}(-\cos\varphi\cos\theta\sin\varphi+\cos\theta\sin\varphi\cos\varphi)=0,$$

因此 p_y 是 $\hat{L}_y$ 的本征函数,本征值为零. 可以证明 p_y 不是 $\hat{L}_z$ 和 $\hat{L}_x$ 的本征函数.

$$\hat{L}_z p_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta\right)=0,$$

因此 p_z 是 $\hat{L}_z$ 的本征函数,本征值为零. 可以证明 p_z 不是 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的本征函数.

习　题

1.4.1　将角波函数方程进一步分离变量,成为两个独立变量 θ 和 φ 的方程.

1.4.2　证明:(1) p_x 不是 $\hat{L}_y$ 和 $\hat{L}_z$ 的本征函数;(2) p_y 不是 $\hat{L}_z$ 和 $\hat{L}_x$ 的本征函数;(3) p_z 不是 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的本征函数.

1.4.3　p 函数的实数解 p_x, p_y, p_z 是否是算符 $\hat{L}^2$ 的本征函数? 如果是,本征值是多少?

1.4.4　求算符 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ 对本征函数 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^m N_{lm}\mathrm{P}_l^{|m|}(\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$ 的本征值.

1.4.5　当 $n=1$ 时,可得电子处于基态的能量 E_1. 当 $n=\infty$ 时,$E_\infty=0$,电子不再束缚在核的周围,完全脱离原子核电离,E_∞ 与基态能量 E_1 之差称为电离能. 计算氢原子的基态能量和电离能.

1.4.5　电子偶素是由一个正电子和一个电子所组成的一种束缚系统,求 (1) 基态时正负电子之间的距离;(2) 电离电势和第一激发电势.

第二章　原子物理

2.1　原子结构模型

2.1.1　汤姆孙原子结构模型

电子的发现

1897年英国物理学家汤姆孙(J. J. Thomson)发现了电子，开创了人类认识原子内部结构的新纪元.

阴极射线是低压气体放电过程中出现的一种现象. 有人认为此射线类似紫外线，是一种"以太波"；也有人认为它是由带负电的物质粒子组成. 当时实验上还难以确定. 最后的判定实验是由J. J. 汤姆孙作出的. 外加电磁场能够使带电粒子偏转，当时一些实验没有观测到阴极射线在外加电磁场中偏转. 汤姆孙认真分析了没有偏转的原因可能是因为放电管内的真空度不高，他提高了放电管的真空度，获得了阴极射线束在静磁场或静电场中的稳定偏转. 从而判定它是由带负电的微粒组成.

汤姆孙最杰出的贡献是测定了这种带电微粒的荷质比 q/m，测量的原理是利用静电偏转与磁偏转平衡的条件

$$qE = qvB \tag{2.1.1}$$

确定带电粒子运动速度. 然后将电场切断，带电粒子在磁场区内作圆周运动，其半径 R 由下式确定：

$$qvB = \frac{mv^2}{R}, \tag{2.1.2}$$

由上两式可得带电粒子的荷质比为

$$\frac{q}{m} = \frac{E}{RB^2}. \tag{2.1.3}$$

测量的惊人结果是这种带负电微粒的荷质比竟然比带正电的氢离子大一千多倍. 如果假定这两种粒子所带电荷的绝对值相等，则氢离子质量将是阴极射线中带负电微粒的质量的一千多倍，后来精确测定了这个比值为 1 836. 152 701(37). 这是原子物理学中两个最重要的量纲一常数之一. 另一个是精细结构常数 α.

早在 1890 年，休斯脱(A. Schuster)就得到了阴极射线中带负电粒子荷质比的实验结果，但是他不敢相信自己的测量结果，认为阴极射线中带负电粒子的质量还不到氢原子质量千分之一的结论是荒谬的. 1887 年考夫曼(W. Kaufman)做了类似的实验，他测得的荷质比的数值比汤姆孙的还要精确，他还发现荷质比随粒子速度的改变而改变. 但是他当时没有勇气发表这些结果，他不相信阴极射线是由粒子组成的. 直到 1901 年他才公布自己的实验结果. 汤姆孙以惊人的胆识同传统观念决裂，勇敢地确认了有比氢原子小得多的微粒——电子存在，而被誉为最先打开通向基本粒子物理学大门的伟人. 由此他获得了 1906 年诺贝尔物理学奖.

布丁模型

汤姆孙用经典力学的理论，根据带电粒子之间库仑作用与距离平方成反比进行了大量计算，设计在原子中电子稳定分布的状态，提出了原子结构的布丁(pudding)模型：由于每个原子在整体上是电中性的，汤姆孙假设正电部分均匀分布在一个球体内，电子镶嵌在其中某些平衡位置上，像西餐中一种镶嵌葡萄干的松软甜点. 电子在它们的平衡位置作简谐振动，它们像赫兹振子那样，可以发射或吸收特定频率的电磁辐射. 观测到的原子光谱的各种频率相当于这些振动的频率. 汤姆孙的原子结构模型把当时知道的实验结果和理论考虑都归纳进去了.

2.1.2 卢瑟福核原子结构模型

1892 年林纳德(P. Lenard)在研究阴极射线时发现高速电子很容易穿透原子，将阴极射线从金属窗中引出. 获得了 1905 年诺贝尔物理学奖. 1904 年长冈半太郎(Hantaro Nagaoka)提出了原子的行星模型，认为原子内的正电荷集中于中心，电子绕中心运动.

原子有核模型

1898 年卢瑟福(E. Rutherford)在研究放射性时发现 α 射线和 β 射线. 经过多年的工作,他在 1903～1906 年间[①]证明 α 射线中的粒子(α 粒子)就是氦离子 He^{2+}. 1909 年卢瑟福建议他的助手盖革 (H. Geiger) 和学生马斯顿 (E. Marsden)[②]做 α 粒子在金属表面直接反射的实验. 得到有八千分之一的 α 粒子被大角度散射的统计结果. 从 J. J. 汤姆孙的布丁模型看来,这个结果是难以置信的. 用卢瑟福的话说“这是在我的生活中最不可思议的事件,就像你用一 15 英寸的炮弹轰击一张薄纸被弹回击中你自己一样不可思议”. 因为当时物理学家都相信汤姆孙原子结构布丁模型,由于 α 粒子的质量约为电子质量的 7300 倍,α 粒子的速度和运动方向受原子中电子的影响很小. 而电子的速度改变则大得多. 所以如果电子能离开,就可以只考虑原子正电荷对 α 粒子的作用力. 用高斯定理很容易计算 α 粒子在汤姆孙模型中受原子最大作用力是在原子球的表面. 这个力引起 α 粒子动量的变化 Δp 对原动量的比值就是 α 粒子偏转的角度. 每次碰撞的最大偏转角远小于 1°,有人估算,产生 90°偏转的几率约为 10^{-3500},而盖革和马斯顿的实验结果竟是 1/8000.

卢瑟福为此苦苦思索了很长时间,为了解释这一结果,只有原子内的正电荷集中在比原子直径小得多的范围内,才有可能产生 α 粒子被大角度散射的统计结果. 在进一步确认这一实验事实和严谨推理后,1909 年卢瑟福提出了原子的核式结构模型. 即原子中的正电荷集中在原子中心很小的体积中,但它占有 99.9%以上的质量,即原子有一个核.

卢瑟福确信自己的看法有坚实的实验依据,但是很不完善. 冒着与经典理论冲突的危险,不惜向经典理论和权威挑战,1911 年卢瑟福大胆地发表了他的理论推算结果[③],当时遭到了大多数同行的冷遇,但是玻尔非常赞赏这一富于挑战性的见解.

---

① E. Rutherford, *Phil. Mag.*, **5**(1903)177; **22**(1906) 122, 348.

② E. Rutherford and Royds, *Phil. Mag.*, **27**(1909)281; H. Geiger and E. Msrsden, *Proc. Roy. Soc.*, **A82**(1909)495.

③ E. Rutherford, *Phil. Mag.*, **21**(1911)669.

原子有核模型的困难

很多人不赞同卢瑟福原子有核模型是由于它很难给出一个稳定原子结构的物理图象.按照卢瑟福的有核模型,原子是由带正电荷的原子核和带负电荷的电子组成,它们之间存在库仑静电作用,服从平方反比定律,和天体间的万有引力一样.按照经典力学,必然得出:原子中的电子应该像太阳系中行星绕太阳转动那样,围绕原子核沿圆形或椭圆形轨道运动;电子沿圆形或椭圆形轨道旋转是加速运动,任何作加速运动的带电粒子都要发射电磁波,因此电子必定不断地发射电磁波.电磁波要带走一部分能量,电子在发射电磁波的同时,不断地减小自己的能量,如果电子没有能量补充来源,电子的轨道将不断缩小,最后被吸引到原子核上;若电子运动的周期为 T,则它发射的电磁波的周期也是 T,或电磁波的频率为 $\nu=1/T$,在轨道缩小的同时,周期不断缩小,发射频率不断增大.从大量原子统计效果看,原子光谱应该是连续光谱.

但是事实上电子可以在原子核的周围处于无辐射的状态,原子光谱不是连续光谱,而是分立的线状光谱.是原子结构的有核模型错误,还是经典力学不适用?当时这是物理学家认真思考的问题.玻尔正是在这种情况下,吸取了前人很多正确的思想,包括普朗克的量子假说,爱因斯坦的光子假说,卢瑟福的有核模型,原子光谱的巴耳末公式,1913 年提出了一个革命性的模型,支持了卢瑟福的有核模型,解决了原子稳定性的困难.

2.1.3 卢瑟福散射理论

α 粒子散射实验

卢瑟福把 α 粒子和原子核都看成是没有自旋的点电荷,完全从经典物理推导了 α 粒子的微分散射截面.α 粒子散射实验装置如图 2.1.1 所示.

α 粒子源发射的 α 粒子经一细的通道后,形成一束射线,垂直地打在金属箔上,α 粒子经靶原子散射后,沿散射角 α 射向探测器,记录下某一段时间内在某一方向散射的 α 粒子数.为了避免空气分子的散射,从 α 粒子源到探测器这段路程是在真空中的.

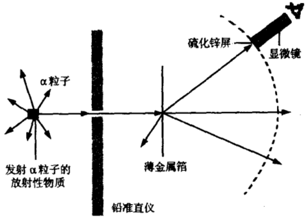


图 2.1.1　卢瑟福散射

库仑散射偏转角

速度为 v、质量为 M 的 α 粒子散射的轨道是一双曲线方程. α 粒子以 θ 角散射时:

$$\cot\frac{\theta}{2}=\frac{4\pi\varepsilon_0}{2Ze^2}Mv^2b=\frac{4\pi\varepsilon_0 E_k}{Ze^2}b, \tag{2.1.4}$$

其中 Z 为靶核原子的正电荷数，$E_k=Mv^2/2$ 为入射 α 粒子的动能. b 称为瞄准距离，无法直接测量. 这就是库仑散射偏转角公式.

卢瑟福散射公式

卢瑟福在研究 α 粒子散射时，作了如下假定：靶核静止，靶粒子无反冲动能，核外电子的作用可以忽略，只考虑库仑作用和单次散射，将 α 粒子作为经典粒子处理. 瞄准距离在 b 和 $b-\mathrm{d}b$ 之间的 α 粒子，散射后向着 θ 和 $\theta+\mathrm{d}\theta$ 之间的角度射出，如图 2.1.2 所示.

凡是通过图中所示的以 b 为外半径、$b-\mathrm{d}b$ 为内半径的环形面积的 α 粒子，必定散射到角度在 θ 和 $\theta+\mathrm{d}\theta$ 之间的一个空心圆锥体之中. 环形面积等于 $\mathrm{d}\sigma(\theta)=2\pi b|\mathrm{d}b|$，如果金属箔的面积为 S，则打在箔靶上的 α 粒子落在一个原子这个圆环上的几率为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{S}=\frac{2\pi b|\mathrm{d}b|}{S}=\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{\pi}{S}\left(\frac{2Ze^2}{Mv^2}\right)^2\frac{\cos\frac{\theta}{2}}{\sin^3\frac{\theta}{2}}\mathrm{d}\theta, \tag{2.1.5}$$

引用立体角 $\mathrm{d}\Omega$:

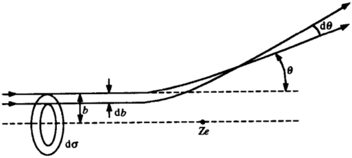


图 2.1.2　α 粒子散射截面

$$\mathrm{d}\Omega = \frac{2\pi r\sin\theta \cdot r\mathrm{d}\theta}{r^2}$$

$$= 2\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta = 4\pi\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{d}\theta, \qquad (2.1.6)$$

则$\frac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{\mathrm{d}\Omega}$表示 α 粒子散射到 θ 角附近单位立体角内每个原子的有效散射截面，又称为微分截面：

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{E_k}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}, \qquad (2.1.7)$$

这就是著名的卢瑟福散射公式. 散射截面 $\sigma(\theta)$的单位是靶恩，简称靶，符号 b：

$$1\ \mathrm{b} = 10^{-28}\ \mathrm{m}^2, \quad 1\ \mathrm{mb} = 10^{-3}\ \mathrm{b}, \quad 1\ \mu\mathrm{b} = 10^{-6}\ \mathrm{b}, \qquad (2.1.8)$$

微分散射截面的单位为 b/sr. 其中 sr 为球面度.

对于一个 α 粒子来说，对应一个原子核就有一个圆环，设单位体积靶内的靶原子数为 n，箔靶的厚度为 t，在此厚度，各个原子核互不遮挡，则共有 nSt 个圆环，散射总截面为 $nSt\ \mathrm{d}\sigma$. 散射几率为散射总截面与箔靶的面积 S 之比. 单位时间内有 N 个 α 粒子垂直入射到靶上，则单位时间内在 θ 角方向立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 内被靶原子散射的 α 粒子与入射 α 粒子的总数 N 之比为

$$f = \frac{\mathrm{d}N}{N} = \frac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{S}nSt = nt\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{Mv^2}\right)^2 \frac{\mathrm{d}\Omega}{\sin^4\frac{\theta}{2}}, \qquad (2.1.9)$$

瞄准距离小于或等于 b 的入射 α 粒子，其散射角必然大于或等于 θ.

凡入射 α 粒子瞄准面积等于 πb^2 的[1]，其散射角必定大于或等于 θ，如图 2.1.3 所示. 因此散射角大于或等于 θ 的 α 粒子数与全部入射 α 粒子数之比为：

$$f_1=\frac{ntS\sigma}{S}=nt\sigma=nt\pi b^2$$
$$=\pi nt\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 E_k}\right)^2\cot^2\frac{\theta}{2}. \qquad (2.1.10)$$

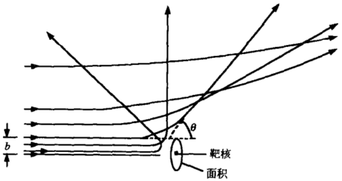


图 2.1.3 α 粒子不同角度的散射. 瞄准距离小于或等于 b 的入射 α 粒子，其散射角必然大于或等于 θ. 凡入射 α 粒子瞄准面积等于 πb^2 的，其散射角必定大于或等于 θ.

例题 2.1.1 设 α 粒子是钋源放射的，能量为 5.0 MeV，散射体为金箔，厚为 1 μm，$\rho=1.93\times10^4\ \mathrm{kg/m^3}$，$Z=79$，原子量 $A=197$，试求：(1) α 粒子通过金箔在 60°角方向的卢瑟福微分散射截面；(2) 散射角大于 90°的所有 α 粒子占全部入射粒子的百分比.

解 利用组合常数 $\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}=1.439\ 965\ 173\ \mathrm{MeV\cdot fm}\approx 1.44\ \mathrm{MeV\cdot fm}$

(1) $\left.\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}\right|_{\theta=60^\circ}=\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Z}{E_k}\right)^2\frac{1}{\sin^4 30^\circ}=331\ \mathrm{b/sr}.$

(2) $n=\frac{\rho}{A}N_A$

---

[1] Arthur Beiser, Concept of Modern Physics, 5th Ed., McGraw-Hill, Inc. New York(1995), p153.

$$f_1=\frac{ntS\sigma}{S}=nt\sigma=nt\pi b^2=\frac{\pi t\rho N_A}{A}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 E_k}\right)^2\cot^2\frac{\theta}{2}$$
$$=9.6\times10^{-5}.$$

散射总截面

散射到各方向的总截面，等于微分散射截面对所有立体角的积分：

$$\sigma=\int\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}d\Omega=2\pi\int_0^{\pi}\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}\sin\theta d\theta,\qquad(2.1.11)$$

这里假设散射截面对立体角是各向同性的.

原子核大小的推断

由卢瑟福的原子有核结构模型和散射理论，可以推算 α 粒子达到的离原子核的最小距离，这也就是原子核半径的上限. 设 α 粒子离原子核很远时的速度为 v，达到离原子核最小距离 r_m 处的速度为 v'，按能量守恒定律：

$$\frac{1}{2}Mv^2=\frac{1}{2}Mv'^2+\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_m},\qquad(2.1.12)$$

由有心力场中运动的角动量守恒得：

$$Mvb=Mv'r_m,\qquad(2.1.13)$$

消去 v'，代入 (2.1.4) 式中 b 的表达式得：

$$r_m=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Ze^2}{Mv^2}\left(1+\frac{1}{\sin\frac{\theta}{2}}\right),\qquad(2.1.14)$$

显然当 $\sin\frac{\theta}{2}=1,\theta=\pi$ 时 r_m 有极小值. 这相当于背散射，α 粒子的全部动能都用来克服库仑排斥能.

例题 2.1.2 动能为 E 的质子在薄的钍靶上散射，直到 $E=4.3\times10^6$ eV仍然符合卢瑟福公式，试由此估计核力的作用半径.

解 钍的原子序数为 $Z=90$，$r_m=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{2Ze^2}{\frac{1}{2}Mv^2}=6.03\times10^{-14}$ m.

卢瑟福散射讨论

对于动能为 MeV 的 α 粒子，其德布罗意波长约为 10^{-14} m，比原子的尺度小得多，与原子核的尺度相当，因此在讨论与原子核散射

时，可作为经典粒子处理．靶核静止的假定不影响结果，在质心坐标系公式仍然成立．由于原子核外电子的质量远小于 α 粒子的质量，因此它们对 α 粒子运动的影响可以忽略．

计算时将单原子的散射截面乘以原子数，这要求箔靶中原子前后不相互遮挡，这样对箔靶的厚度有限制．通常金属箔的厚度约为 0.5 μm，对直径为 3×10^{-10} m 的金原子来说，仍然有约 1000 个原子的厚度，但是如果考虑其原子核的直径约为 10^{-14} m，原子核的几何截面至多是原子截面的 10^{-8}，原子核前后遮蔽的可能性很小．如果厚度增加，前后遮蔽的机会就要增加．

如图 2.1.4 所示，卢瑟福散射公式在散射角$5°<\theta<150°$范围内与实验一致．实验结果进一步表明卢瑟福散射公式在散射角$5°<\theta<180°$范围内是成立的．只在特殊情况下在 180°附近有偏离．卢瑟福散射公式不适用于小角散射．小角散射对应大的瞄准距离，这时核外电子的屏蔽作用不可忽略．当瞄准距离达到原子大小时，原子呈中性，库仑散射不会发生．

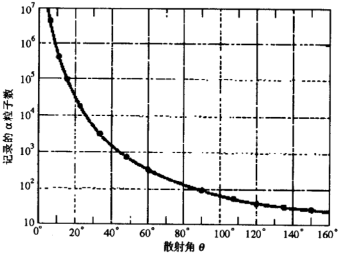


图 2.1.4　卢瑟福散射公式适用的角度范围

α 粒子通过金属箔，经过了很多原子核的附近，实际上是经过很多次散射的．但是由于原子核直径很小，多次接近原子核的机会不大，只有瞄准距离 b 较小时，才出现大角散射．实际观测到的较大 θ

角的散射，可以设想为一次大角散射和多次小角散射合成的结果，但是多次小角散射各个方向都有可能，相当多的部分被抵消了. 多次小角散射的总结果比一次大角散射要小得多，因此有大角散射时，小角散射可以不计，一次散射的近似是可行的.

2.1.4 原子的组成和大小

电子的电荷质量和大小

汤姆孙在测定电子的荷质比后不到两年，利用饱和蒸气中电荷可以作为凝聚核，他测定了雾滴的数目和电荷总量，推算出电子电荷的平均值：3×10^{-10}绝对静电单位. 1910 年密立根(R. A. Millikan)在著名的"液滴实验"中，精确测定了电子电荷，他的数值为：4.78×10^{-10}绝对静电单位，即 1.59×10^{-19}库仑，很多年来一直被认为是最精确的数值. 密立根因此获得了 1923 年诺贝尔物理学奖. 直到 1929 年才发现它约有 1%的误差，来自对空气粘滞性测量的偏离. 电子电荷的精确值为

$$e = 1.602\ 177\ 33(49)\times10^{-19}\,\mathrm{C}, \qquad (2.1.15)$$

电子的质量为

$$m_e = 9.109\ 389\ 7(54)\times10^{-28}\mathrm{g}. \qquad (2.1.16)$$

假设电子是一个半径为 r_e 的球，其静电自能约为 $e^2/4\pi\varepsilon_0 r_e$，假设电子的静质能 mc^2 完全来自它的静电自能，则可以算出所谓的电子经典半径 $r_e=e^2/4\pi\varepsilon_0 mc^2$，数值为 2.817 940 92 fm. 高能正负电子对撞实验表明，电子在 10^{-18} m 的范围仍可以看作是点粒子.

原子的组成

原子核的半径可以通过卢瑟福散射来估算，约为1.2～1.4 fm. 卢瑟福散射实验表明原子是由原子核和核外运动的电子组成. 根据材料的质量密度可以估算原子的大小约为 0.1 nm 左右. 原子核的质量近似等于元素的原子量.

习　题

2.1.1　动能为 5.00 MeV 的 α 粒子被金核以 90°角散射时，它的瞄准距离为多大？

2.1.2　一束 α 粒子垂直射至一重金属箔上，求 α 粒子被金属散射后，散射角大于 60°的 α 粒子数与散射角大于 90°的 α 粒子数之比.

2.1.3　由加速器产生的能量为 1.2 MeV、束流为 5.0 nA 的质子束，垂直地射到厚为 1.5 μm 的金箔上，试求 5 分钟内被金箔散射到下列角间隔内的质子数：$59° \leqslant \theta \leqslant 61°$；$0° \leqslant \theta \leqslant 10°$；$60° \leqslant \theta \leqslant 180°$.

2.1.4　有两块金箔单独产生的卢瑟福散射完全相同. 当将两块合在一起时，发现在同一角度上的散射几率为两者单独散射时的 2.1 倍. 如果 α 粒子的初始能量为 5.0 MeV，由微分散射截面与入射粒子相关，计算其在穿过一块金箔后损失的能量.

2.1.5　一个能量为 5.30 MeV 的 α 粒子瞄准一个金原子核，试计算它们之间的最短距离. 如果是一个铜原子核呢？

2.1.6　假定 α 粒子和金原子核的半径分别为 1.8 fm 和 6.98 fm，求入射的 α 粒子具有多大动能时，才能碰到金原子核？

2.1.7　被电势差 4 MV 加速的 α 粒子束，垂直地射到质量厚度 $\rho d = 1.9\times10^{-2}\ \mathrm{kg\cdot m^{-2}}$的 ${}^{238}_{92}\mathrm{U}$箔上，有 0.5% 的粒子被散射到 10°和 30°之间. (1) 试确定阿伏伽德罗常数的值. (2) 如果质子的能量相应于同样的加速电势差，求被铀箔散射到上述散射角间隔中质子的相对数目.

2.1.8　按经典力学模型，粒子在一半径为 a 的“硬球”上的散射势是球对称势：

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < a, \\ 0, & r > a, \end{cases}$$

散射角 θ 与对球心的瞄准距离 b 的关系为

$$\theta = \begin{cases} 2\cos^{-1}\dfrac{b}{a}, & b < a, \\ 0, & b > a, \end{cases}$$

试写出粒子的微分散射截面和散射总截面.

2.2　原子的电子壳层结构

2.2.1　氢原子的轨道磁矩

在 ψ_{nlm}量子态下，从统计的意义上说，电子绕原子核运动形成的平均电流分布密度可以由平均几率流密度乘上电子电荷决定：

$$j = \frac{\mathrm{i}e\hbar}{2\mu}(\psi_{nlm}^* \nabla \psi_{nlm} - \psi_{nlm} \nabla \psi_{nlm}^*).$$

(2.2.1)

利用球坐标中的梯度表达式：

$$\nabla = e_r \frac{\partial}{\partial r} + e_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + e_\varphi \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

(2.2.2)

由此可以求出 j 的各分量. 由于 ψ_{nlm} 中径向波函数 $R_{nl}(r)$ 及 θ 部分波函数 $\mathrm{P}_l^{|m|}(\cos\theta)$ 都是实数，由(2.2.1)很容易看出 $j_r = j_\theta = 0$，只剩下含有$\frac{\partial}{\partial \varphi}$项的绕 z 轴的环电流密度：

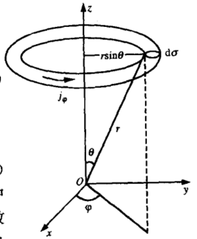


图 2.2.1　氢原子的轨道磁矩

$$\begin{aligned} j_\varphi &= \frac{\mathrm{i}e\hbar}{2\mu} \frac{1}{r\sin\theta}\left(\psi_{nlm}^* \frac{\partial}{\partial \varphi}\psi_{nlm} - \psi_{nlm} \frac{\partial}{\partial \varphi}\psi_{nlm}^* \right) \\ &= \frac{\mathrm{i}e\hbar}{2\mu} \frac{1}{r\sin\theta} 2\mathrm{i}m_l |\psi_{nlm}|^2 = -\frac{e\hbar m_l}{\mu} \frac{1}{r\sin\theta} |\psi_{nlm}|^2. \end{aligned} \qquad (2.2.3)$$

以 z 轴为中心的截面积为 $\mathrm{d}\sigma$ 的圆环中的电流元为 $\mathrm{d}I = j_\varphi \mathrm{d}\sigma$，圆环的面积为 $S = \pi(r\sin\theta)^2$，它对磁矩的贡献为

$$\begin{aligned} \mu_z &= \int S\mathrm{d}I = \int \pi(r\sin\theta)^2 j_\varphi \mathrm{d}\sigma = -\frac{e\hbar}{2m} m_l \int |\psi_{nlm}|^2 2\pi r\sin\theta \mathrm{d}\sigma \\ &= -\frac{e\hbar}{2m} m_l \int |\psi_{nlm}|^2 \mathrm{d}\tau = -\frac{e}{2m} m_l \hbar = -\frac{e}{2m} L_z, \end{aligned} \qquad (2.2.4)$$

其中 L_z 为电子的轨道角动量(orbital angular momentum)的 z 分量. 与轨道角动量矢量 $\boldsymbol{L}$ 对应有电子的轨道磁矩(orbital magnetic moment)：

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m}\boldsymbol{L}, \qquad (2.2.5)$$

对轨道磁矩的 z 分量可以表示为

$$\mu_z = -m_l \frac{e\hbar}{2m} = -m_l \mu_{\mathrm{B}}, \qquad (2.2.6)$$

其中

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 5.788\ 382\ 63(52) \times 10^{-5}\ \mathrm{eV/T} \qquad (2.2.7)$$

称为玻尔磁子.氢原子中的电子轨道磁矩在 z 分量是量子化的,为玻尔磁子的整数倍.

2.2.2 电子自旋

原子在非均匀外磁场中的运动

假设外磁场 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 方向.具有磁矩 μ 的体系,在外磁场中的势能为

$$U = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\mu_z B, \qquad (2.2.8)$$

如果磁场 $\boldsymbol{B}$ 在 z 轴方向不均匀,则体系将受一沿 z 方向的力

$$f_z = -\frac{\partial U}{\partial z} = \mu_z\frac{\partial B}{\partial z}. \qquad (2.2.9)$$

原子在非均匀外磁场方向的加速度为 $a_z = f_z/M$,M 为原子的质量.如果进入非均匀外磁场的原子具有垂直于磁场梯度方向的速度 v,由于原子在垂直于磁场梯度方向不受磁场力,原子在此方向上将以速度 v 作匀速直线运动,如果运动的距离,即非均匀外磁场区域的距离为 L,则原子在非均匀外磁场区域中运动的时间为 L/v.这样原子在非均匀外磁场梯度方向偏转的距离为

$$\Delta z = \frac{1}{2}at^2 = \frac{1}{2}\frac{\mu_z(\partial B/\partial z)}{M}\left(\frac{L}{v}\right)^2. \qquad (2.2.10)$$

具有磁矩 μ_z 的原子穿过非均匀磁场时,在平行于磁场力的作用下沿磁场方向偏转,如果原子磁矩 μ_z 取连续值,则具有不同磁矩 μ_z 的原子偏转后在空间连续分布.

斯特恩-盖拉赫实验

为了从实验上证实原子角动量是量子化的,1922 年斯特恩(O. Stern)和盖拉赫(W. Gerlach)完成了下列实验①.如图 2.2.2 所示,从高温炉出来的银原子流经一窄缝形成一原子射线束,银原子射线束射入不均匀的磁场区域,被磁力偏转后溅落在屏上,偏转的方向和

① W. Gerlach and O. Stern, *Zeitschrift für Physik*, **9**(1922)34.

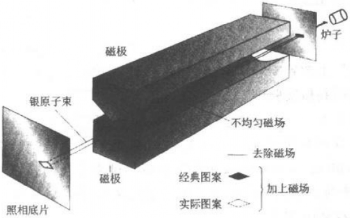


图 2.2.2　斯特恩-盖拉赫实验. 左图为实验装置示意图，右下图为银原子束产生的两条斑纹

大小，取决于磁矩 μ_z 的正负和大小. $\mu_z>0$ 时受力向上，向上偏转；$\mu_z<0$ 时受力向下，向下偏转. 如果入射银原子的磁矩在磁场中可以任意取向，μ_z 从正到负连续变化，银原子束偏转后将在屏上溅落成一片. 实验中在屏上可观测到几条清晰可辨的黑斑. 这表明银原子磁矩只取几个特定的方向，从而原子角动量只取几个特定的方向，证明了角动量的投影是量子化的. 由于温度为 11 604.45 K 的热运动能量 k_BT 为 1 eV，而一般原子的第一激发态到基态的能量差约为 10 eV 的量级，在几千度的高温炉中的原子很难被激发，绝大多数原子处于基态. 因此斯特恩-盖拉赫实验主要显示原子的基态角动量和磁矩. 如果只考虑轨道角动量，一般情况下，斑纹条数为 $2l+1$. 观测到斑纹条数后可反推角量子数 l.

对于 Li，Na，K，Cu，Ag，Au 等原子，测得的斑纹条数为 2，反推得角量子数为 1/2，而电子轨道角动量的理论值只能是零和正整数，因此这些斑纹不可能是由轨道磁矩产生的. 斯特恩-盖拉赫实验明确地给出了一个信息：原子中的电子不只具有轨道角动量，一定还具有其他形式的角动量.

对于 Zn，Cd，Hg，Sn 等原子，射线没有偏转，说明这些原子没有固有磁矩，它们的总角动量为 0. 对于基态 O 原子，观测到 5 条斑纹，说明它的角动量投影有 5 个取向，磁量子数 $m_l=-2,-1,0,1,2$，而

定出它的角量子数 $l=2$. 但是理论上对 O 原子 $l=1$,理论和实验不符.

斯特恩-盖拉赫实验可以做成一个原子磁能态选择器,在磁铁后面适当位置上放置窄缝,可以选择处于某一能态的原子通过,这个技术在拉比磁共振实验中有广泛的应用.

例题 2.2.1 在斯特恩-盖拉赫实验中,原子束穿过 $L=3.5$ cm 长的磁体处的磁场梯度为 1.4 T/mm,银原子束中原子的最可几速率为 $v=750$ m/s,求此银原子束刚出磁体时分裂为两原子束间的距离. 银原子的质量为 $M=1.8\times10^{-25}$ kg,银原子的磁矩为一个玻尔磁子: 9.27×10^{-24} J/T.

解 应用公式(2.2.10)得银原子束刚出磁体时分裂为两束的距离:

$$d = 2\Delta z = \frac{\mu_z(\partial B/\partial z)}{M}\left(\frac{L}{v}\right)^2 = 0.16 \text{ mm}$$

电子自旋

G. E. Uhlenbeck 和 S. A. Goudsmit[①]于 1925 年根据斯特恩-盖拉赫实验、反常塞曼效应和光谱的精细结构(fine structure)等提出电子本身具有固有的自旋角动量(spin angular momentum)$\boldsymbol{S}$. 和这个固有的自旋角动量相联系的固有磁矩为 $\boldsymbol{\mu}_s$,

$$\boldsymbol{S}^2 = s(s+1)\hbar^2, \quad s = \frac{1}{2}, \tag{2.2.11}$$

$$S_z = m_s\hbar, \quad m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}. \tag{2.2.12}$$

电子的自旋磁矩(spin magnetic moment)和自旋角动量的关系为

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{g_s e}{2m}\boldsymbol{S} = -\frac{g_s\mu_B}{\hbar}\boldsymbol{S}, \tag{2.2.13}$$

$$\mu_{sz} = -g_s\mu_B m_s, \tag{2.2.14}$$

$$g_s = 2 \tag{2.2.15}$$

称为电子的自旋 g_s 因子. 同轨道磁矩的公式(2.2.5)对照,轨道 g_l

---

① G. E. Uhlenbeck and S. Goudsmit, *Naturwissenschaften*, **13**(1925) 953; *Nature*, **117**(1926)264.

因子等于 1.

电子自旋不是电子绕自身轴旋转，狄拉克从相对论波动方程推导出电子自旋，说明电子自旋是一种相对论效应.

2.2.3 电子壳层结构

中心场近似(central-field approximation)

氢原子中电子的运动状态由四个量子数 n,l,m_l 和 m_s 表示. 原子序数为 Z 的多电子原子，是个复杂的多体系统，一个由电荷为 Ze 的原子核和核外有 N 个电子组成的多电子原子，其哈密顿量为

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{\nabla_i^2}{2m}-\sum_i\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_i}+\sum_{i,j}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}}+V_{so}+V_{ss}+\cdots, \tag{2.2.16}$$

式中第一项为电子的动能，第二项为电子和原子核之间的静电作用势能，第三项为电子之间的静电作用势能，V_{so}为电子的自旋-轨道之间的磁相互作用能，V_{ss}为电子之间的自旋-自旋的磁相互作用能，还有电子磁矩和原子核磁矩之间的相互作用能等等. 要严格解这样严格哈密顿量的本征方程几乎是不可能的. 在忽略磁相互作用的情况下，考虑哈密顿量中的前三项，如果只考虑前两项，这是 N 个无相互作用单电子的哈密顿量，从这个哈密顿量得到的波函数由多电子波函数组成，它的能级次序只由各个电子的主量子数 n 决定. 这样得到的原子能级和实际能级相差太大. 第三项电子之间的势能会使原子能级的能量提高许多，不能看作是微扰. 通常将电子之间的静电排斥势能中球对称部分 $S(r_i)$归入第二项，将电子看成是在一个中心场 $\sum_{i=1}^{N}V(r_i)$中运动，只不过，由于斥力的影响，核的库仑引力被部分地屏蔽了. 总的中心势为[①]

$$\sum_{i=1}^{N}V(r_i)=\sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_i}+S(r_i)\right], \tag{2.2.17}$$

---

① G. K. Woodgate, Elementary Atomic Structure, 2nd Edition, Clarendon Press. Oxford, 1980, p97.

剩余的静电相互作用势能为

$$H_1 = \sum_{i,j} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}} - \sum_{i=1}^{N} S(r_i), \tag{2.2.18}$$

称为剩余静电势，是非中心斥力的作用. 这样剩余静电势 H_1 引起的能量修正就比较小了，可以看成微扰. 原子哈密顿量可以写成

$$H = H_0 + H_1, \tag{2.2.19}$$

其中

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(r_i) \right], \tag{2.2.20}$$

$H_1 \ll H_0$. 零级近似的本征方程只和每个电子的坐标有关，可以分离成单个电子的方程，和氢原子类似，每个电子的状态可以用一组量子数 n, l, m_l, m_s 描述，系统的零级近似总波函数由各电子的波函数的乘积组成，原子的零级近似能量是各个电子能量的总和：

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_{n_i l_i}. \tag{2.2.21}$$

多电子原子中的电子可以按一定规律具有不同的量子数 n, l, m_l, m_s，通常称为量子数原理(quantum number principle).

泡利不相容原理(Pauli's exclusion principle)

在同一原子中，不可能有两个电子具有完全相同的量子数(n, l, m_l, m_s).

由于对于每一个 l 可以有 $2l+1$ 个 m_l 值，对每一个 m_l 又可以有两个不同的 m_s 值，因此对每一个 l 可以有 $2(2l+1)$个不同的量子态. 因此每一个具有相同角量子数 l 的支壳层(sub-shell)中最多可以容纳的电子数为：

$$N_l = 2(2l + 1). \tag{2.2.22}$$

而每一个具有相同主量子数 n 值的主壳层(main shell)中最多可以容纳的电子数为

$$\begin{aligned} N_n &= \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) \\ &= 2[1 + 3 + \cdots + (2n - 1)] = 2n^2, \end{aligned} \tag{2.2.23}$$

因此在各主壳层和次壳层中最多可以容纳的电子数如下表：

表 2.2.1 主壳层和支壳层填充的电子数

n \ l		0 s	1 p	2 d	3 f	4 g	5 h	$2n^2$
1	K	2						2
2	L	2	6					8
3	M	2	6	10				18
4	N	2	6	10	14			32
5	O	2	6	10	14	18		50
6	P	2	6	10	14	18	22	72

能量最低原理(minimum energy principle)

在基态原子中的电子先填充能量较低的壳层和支壳层.单个电子的能量的主要部分取决于主量子数 n,同时也与角量子数有关.主量子数越大,能量越高;角量子数越大,能量也越高.对多电子原子,由于电子间存在相互作用,支壳层能量高低的顺序根据实验数据由 $n+0.7l$ 的值确定,其值越大,能量越高.由此可知各支壳层能量由低到高的顺序和相应最多填充电子数为:

1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p	5s	4d	5p	6s	4f	5d	6p	7s	5f…
2	2	6	2	6	2	10	6	2	10	6	2	14	10	6	2	14
2	4	10	12	18	20	30	36	38	48	54	56	70	80	86	88	102

例题 2.2.2 轨道角动量 L_z 的量子化意味着它和总角动量 L 之间的夹角是量子化的.试给出此夹角的表达式,并计算 $l=1,2$ 时此夹角的最小值.

解 $\theta=\arccos\dfrac{L_z}{L}=\arccos\dfrac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$,

$$\theta_{\min}=\arccos\frac{m_{\max}}{\sqrt{l(l+1)}}=\begin{cases}45.0^\circ, & l=1,\\ 35.3^\circ, & l=2.\end{cases}$$

例题 2.2.3 爱因斯坦-德哈斯效应:1915 年爱因斯坦和劳伦兹的女婿德哈斯作了一个实验:半径为 5 mm 的没有磁化的铁圆柱体,悬挂在无摩擦轴承上,可以绕轴自由转动.突然加一平行于轴的磁场引起铁原子的磁偶极矩使它们平行于磁场.铁原子轨道角动量矢量和磁偶极矩矢量耦合使铁圆柱体转动.假定每个铁原子的轨道

角动量为$\hbar$,铁的摩尔质量为 55.8 g/mol. 求铁圆柱体的转动周期.

解 由于角动量守恒,旋转铁圆柱体的角动量 L_{cyl} 等于铁原子平行磁场排列的铁原子的总角动量 L_{atoms}.

$$L_{atoms} = N\hbar = N_A m\hbar/M,$$

$$L_{cyl} = I\omega = \frac{1}{2}mR^2 2\pi/T,$$

$$T = \frac{\pi R^2 M}{N_A \hbar} = 19.2\ \text{h}.$$

电子组态(electron configuration)

原子的电子组态就是原子中各电子所处的状态(用 n,l 表示)的总称,也就是原子中电子按壳层排列的组配方式. 例如钠 (Na,Z=11) 处于基态的电子组态是 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$,可简写成[Ne]$3s^1$. [Ne]表示惰性气体元素 Ne 满壳层的电子组态 $1s^2 2s^2 2p^6$. 所有元素基态的电子组态和原子基态列在表 2.2.2 中.

表 2.2.2 元素基态时的电子组态和原子态

Z	元素	电子组态	第一电离能 (eV)	原子态	Z	元素	电子组态	第一电离能 (eV)	原子态
1	H	1s	13.599	$^2S_{1/2}$	20	Ca	[Ar]$(4s)^2$	6.111	$^1S_0$
2	He	$(1s)^2$	24.581	$^1S_0$	21	Sc	[Ar]$3d(4s)^2$	6.538	$^2D_{3/2}$
3	Li	[He]2s	5.390	$^2S_{1/2}$	22	Ti	[Ar]$(3d)^2(4s)^2$	6.818	$^3F_2$
4	Be	[He]$(2s)^2$	9.320	$^1S_0$	23	V	[Ar]$(3d)^3(4s)^2$	6.743	$^4F_{3/2}$
5	B	[He]$(2s)^2 2p$	8.296	$^2P_{1/2}$	24	Cr	[Ar]$(3d)^5 4s$	6.764	$^7S_3$
6	C	[He]$(2s)^2(2p)^2$	11.265	$^3P_0$	25	Mn	[Ar]$(3d)^5(4s)_2$	7.432	$^6S_{5/2}$
7	N	[He]$(2s)^2(2p)^3$	14.545	$^4S_{3/2}$	26	Fe	[Ar]$(3d)^6(4s)^2$	7.868	$^5D_4$
8	O	[He]$(2s)^2(2p)^4$	13.614	$^3P_2$	27	Co	[Ar]$(3d)^7(4s)^2$	7.862	$^4F_{9/2}$
9	F	[He]$(2s)^2(2p)^5$	17.418	$^2P_{3/2}$	28	Ni	[Ar]$(3d)^8(4s)^2$	7.633	$^3F_4$
10	Ne	[He]$(2s)^2(2p)^6$	21.559	$^1S_0$	29	Cu	[Ar]$(3d)^{10}4s$	7.724	$^2S_{1/2}$
11	Na	[Ne]3s	5.138	$^2S_{1/2}$	30	Zn	[Ar]$(3d)10(4s)^2$	9.391	$^1S_0$
12	Mg	[Ne]$(3s)^2$	7.644	$^1S_0$	31	Ga	[Ar]$(3d)^{10}(4s)^2 4p$	6.00	$^2P_{1/2}$
13	Al	[Ne]$(3s)^2 3p$	5.984	$^2P_{1/2}$	32	Ge	[Ar]$(3d)^{10}(4s)^2(4p)^2$	7.88	$^3P_0$
14	Si	[Ne]$(3s)^2(3p)^2$	8.149	$^3P_0$	33	As	[Ar]$(3d)^{10}(4s)^2(4p)^3$	9.81	$^4S_{3/2}$
15	P	[Ne]$(3s)^2(3p)^3$	10.484	$^4S_{3/2}$	34	Se	[Ar]$(3d)^{10}(4s)^2(4p)^4$	9.750	$^3P_2$
16	S	[Ne]$(3s)^2(3p)^4$	10.357	$^3P_2$	35	Br	[Ar]$(3d)^{10}(4s)^2(4p)^5$	11.84	$^2P_{3/2}$
17	Cl	[Ne]$(3s)^2(3p)^5$	13.01	$^2P_{3/2}$	36	Kr	[Ar]$(3d)^{10}(4s)^2(4p)^6$	13.996	$^1S_0$
18	Ar	[Ne]$(3s)^2(3p)^6$	15.755	$^1S_0$	37	Rb	[Kr]5s	4.176	$^2S_{1/2}$
19	K	[Ar]4s	4.339	$^2S_{1/2}$	38	Sr	[Kr]$(5s)^2$	5.692	$^1S_0$

续表

Z	元素	电子组态	第一电离能 (eV)	原子态	Z	元素	电子组态	第一电离能 (eV)	原子态
39	Y	$[Kr]4d(5s)^2$	6.377	$^2D_{3/2}$	80	Hg	$[Xe](4f)^{14}(5d)^{10}(6s)^2$	10.434	$^1S_0$
40	Zr	$[Kr](4d)^2(5s)^2$	6.837	$^3F_2$	81	Tl	$[Hg]6p$	6.106	$^2P_{1/2}$
41	Nb	$[Kr](4d)^4 5s$	6.881	$^6D_{1/2}$	82	Pb	$[Hg](6p)^2$	7.415	$^3P_0$
42	Mo	$[Kr](4d)^5 5s$	7.10	$^7S_3$	83	Bi	$[Hg](6p)^3$	7.287	$^4S_{3/2}$
43	Tc	$[Kr](4d)^5(5s)^2$	7.228	$^6S_{9/2}$	84	Po	$[Hg](6p)^4$	8.43	$^3P_2$
44	Rn	$[Kr](4d)^7 5s$	7.365	$^5F_5$	85	At	$[Hg](6p)^5$	9.5	$^2P_{3/2}$
45	Rh	$[Kr](4d)^8 5s$	7.461	$^4F_{9/2}$	86	Rn	$[Hg](6p)^6$	10.745	$^1S_0$
46	Pd	$[Kr](4d)^{10}$	8.334	$^1S_0$	87	Fr	$[Rn]7s$	4.0	$^2S_{1/2}$
47	Ag	$[Kr](4d)^{10}5s$	7.574	$^2S_{1/2}$	88	Ra	$[Rn](7s)^2$	5.277	$^1S_0$
48	Cd	$[Kr](4d)^{10}(5s)^2$	8.991	$^1S_0$	89	Ac	$[Rn]6d(7s)^2$	6.9	$^3D_{3/2}$
49	In	$[Kr](4d)^{10}(5s)^2 5p$	5.785	$^2P_{1/2}$	90	Th	$[Rn](6d)^2(7s)^2$		$^3F_2$
50	Sn	$[Kr](4d)^{10}(5s)^2(5p)^2$	7.342	$^3P_0$	91	Pa	$[Rn](5f)^2 6d(7s)^2$	5.7	$^4K_{11/2}$
51	Sb	$[Kr](4d)^{10}(5s)^2(5p)^3$	8.639	$^4S_{3/2}$	92	U	$[Rn](5f)^3 6d(7s)^2$	6.08	$^5L_6$
52	Te	$[Kr](4d)^{10}(5s)^2(5p)^4$	9.01	$^3P_2$	93	Np	$[Rn](5f)^4 6d(7s)^2$	5.8	$^6L_{11/2}$
53	I	$[Kr](4d)^{10}(5s)^2(5p)^5$	10.454	$^2P_{3/2}$	94	Pu	$[Rn](5f)^6(7s)^2$	5.8	$^7F_0$
54	Xe	$[Kr](4d)^{10}(5s)^2(5p)^6$	12.127	$^1S_0$	95	Am	$[Rn](5f)^7(7s)^2$	6.05	$^8S_{7/2}$
55	Cs	$[Xe]6s$	3.893	$^2S_{1/2}$	96	Cm	$[Rn](5f)^7 6d(7s)^2$	6.15	$^9D_2$
56	Ba	$[Xe](6s)^2$	5.210	$^1S_0$	97	Bk	$[Rn](5f)^9(7s)^2$		$^8H_{17/2}$
57	La	$[Xe]5d(6s)^2$	5.61	$^2D_{3/2}$	98	Cf	$[Rn](5f)^{10}(7s)^2$		$^5I_8$
58	Ce	$[Xe]4f5d(6s)^2$	6.54	$^1G_4$	99	Es	$[Rn](5f)^{11}(7s)^2$		$^4I_{15/2}$
59	Pr	$[Xe](4f)^3(6s)^2$	5.48	$^4I_{9/2}$	100	Fm	$[Rn](5f)^{12}(7s)^2$		$^3H_6$
60	Nd	$[Xe](4f)^4(6s)^2$	5.51	$^5I_4$	101	Md	$[Rn](5f)^{13}(7s)^2$		$^2F_{7/2}$
61	Pm	$[Xe](4f)^5(6s)^2$	5.55	$^6H_{5/2}$	102	No	$[Rn](5f)^{14}(7s)^2$		$^1S_0$
62	Sm	$[Xe](4f)^6(6s)^2$	5.63	$^7F_0$	103	Lr	$[Rn](5f)^{14}6d(7s)^2$		$^2D_{5/2}$
63	Eu	$[Xe](4f)^7(6s)^2$	5.67	$^8S_{7/2}$	104	Rf	$[Rn](5f)^{14}(6d)^2(7s)^2$		$^3F_2$?
64	Gd	$[Xe](4f)^7 5d(6s)^2$	6.16	$^9D_2$	105	Db			
65	Tb	$[Xe](4f)^9(6s)^2$	6.74	$^6H_{15/2}$	106	Sg			
66	Dy	$[Xe](4f)^{10}(6s)^2$	6.82	$^5I_3$	107	Bh			
67	Ho	$[Xe](4f)^{11}(6s)^2$	6.02	$^4I_{15/2}$	108	Hs			
68	Er	$[Xe](4f)^{12}(6s)^2$	6.10	$^3H_6$	109	Mt			
69	Tm	$[Xe](4f)^{13}(6s)^2$	6.18	$^2F_{7/2}$	110				
70	Yb	$[Xe](4f)^{14}(6s)^2$	6.22	$^1S_0$	111				
71	Lu	$[Xe](4f)^{14}5d(6s)^2$	6.15	$^2D_{3/2}$	112				
72	Hf	$[Xe](4f)^{14}(5d)^2(6s)^2$	7.0	$^3F_2$	113				
73	Ta	$[Xe](4f)^{14}(5d)^3(6s)^2$	7.88	$^4F_{3/2}$	114				
74	W	$[Xe](4f)^{14}(5d)^4(6s)^2$	7.98	$^5D_0$					
75	Re	$[Xe](4f)^{14}(5d)^5(6s)^2$	7.87	$^6S_{5/2}$					
76	Os	$[Xe](4f)^{14}(5d)^6(6s)^2$	8.7	$^5D_4$					
77	Ir	$[Xe](4f)^{14}(5d)^7(6s)^2$	9.2	$^4F_{9/2}$					
78	Pt	$[Xe](4f)^{14}(5d)^9 6s$	8.88	$^3D_3$					
79	Au	$[Xe](4f)^{14}(5d)^{10}6s$	9.223	$^2S_{1/2}$					

2.2.4 元素周期表

周期表中的周期

每一个周期的开始，电子填充新的主量子数的 s 能级，对应新的碱金属元素. 每一个周期的结束电子填满新的满壳层，对应新的惰性气体元素. 气态原子失去一个电子成为一价气态正离子所需的最低能量成为原子的第一电离能. 所有的碱金属元素都是在惰性气体元素的满壳层外增加一个新的主量子数 s 电子. 这个价电子的电离能相对很小；碱土金属比碱金属多一个 s 电子. 主族元素具有相同的最外 s 壳层和 p 壳层电子组态，副族元素具有不同的 d 壳层或 f 壳层的电子组态. 而惰性气体元素由于满壳层结构，它的最外壳层的价电子的第一电离能很高，因此元素的第一电离能在每一个周期都是由碱金属的最小不断增大到最后的惰性气体元素的最大. 第一电离能这种周期性的变化见图 2.2.3.

满壳层和幻数

对应每一个周期，电子填充新的满壳层，相应新的满壳层(closed shell)最多填充的电子数分别为：2,8,8,18,18,32,…，所有的每一个周期最多填充的电子数分别为：2,10,18,36,54,86,…，这些数称为幻数(magic numbers).

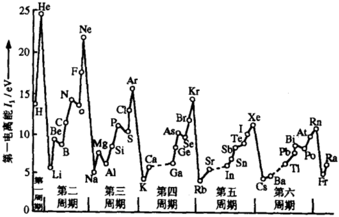


图 2.2.3　第一电离能的周期性变化

习　题

2.2.1　在斯特恩-盖拉赫实验中,处于基态的银原子束通过不均匀横向磁场,磁场梯度为 1.2×10^3 T/m,磁极纵向范围 10 cm,从磁极到屏距离 22 cm,原子的速度 400 m/s,在屏上两束分开的距离 2.1 cm. 试确定原子磁矩在磁场方向上的投影的大小. 设磁场边缘的影响可忽略不计.

2.2.2　一个氢原子中的电子的轨道量子数为 5,求其轨道角动量和 z 分量之间可能的最小的夹角.

2.2.3　轨道角动量 L_z 的量子化意味着它和总角动量 $\boldsymbol{L}$ 之间的夹角是量子化的. 试给出此夹角的表达式,并计算 $l=1,2,3,4,5,10^2,10^3,10^4,\cdots$ 和 10^9 时此夹角的最小值.

2.2.4　当主量子数 $n=4$ 时,求角量子数 l 的最大值、相应的轨道角动量、z 分量的数目、最大角动量的 z 分量值、z 分量和总角动量之间夹角的最小值.

2.2.5　确定原子序数 $Z=8,19,29,39,56$ 元素基态的电子组态.

2.2.6　利用表 2.2.2 讨论元素周期表中各元素基态时的电子组态.

2.3　原子的能级结构

2.3.1　角动量的矢量模型

角动量的矢量模型

在经典理论中,体系的角动量是一个矢量,它的大小和三个方向的投影都有确定值. 在量子力学中,粒子具有波动性,角动量的本征态是环状行波,除角动量的大小 L 确定外,只能再确定它在一个方向的投影 L_z,而幅角 ϕ 和它的另外两个投影 L_x、L_y 则完全不确定,因此角动量不是严格意义上的矢量,不能用通常的矢量法则相加. 为了在几何上形象地描绘,形式上仍用矢量表示,想象为在一锥面上绕 z 轴无规则地快速进动,这个几何图象,称为角动量的矢量模型. ϕ 和 L_z 之间有不确定关系:

$$\Delta\phi\Delta L_z \geqslant \hbar/2, \tag{2.3.1}$$

在这个模型中,由于 $\sqrt{l(l+1)}>l$,因此 L 总大于 L_z,这就保证了 L_x、L_y 是不确定的. 原子中的电子具有自旋角动量 $\boldsymbol{S}$,一般还具有轨道角

动量 $\boldsymbol{L}$,因此具有一总角动量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$. 总角动量的大小 J 和投影 J_z 可以写成：

$$J=\sqrt{j(j+1)}\,\hbar,\quad j=l+s,l+s-1,\cdots,|l-s|, \tag{2.3.2}$$

$$J_z=m_j\hbar,\quad m_j=-j,-j+1,\cdots,j-1,j. \tag{2.3.3}$$

角动量耦合法则

一般情况下,$\boldsymbol{P}_1$ 和 $\boldsymbol{P}_2$ 分别表示以 p_1 和 p_2 为量子数的角动量，它们的数值分别为

$$P_1=\sqrt{p_1(p_1+1)}\,\hbar,\quad P_2=\sqrt{p_2(p_2+1)}\,\hbar, \tag{2.3.4}$$

这两个角动量耦合为一总角动量 $\boldsymbol{P}$,

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}_1+\boldsymbol{P}_2,\quad P=\sqrt{p(p+1)}\,\hbar, \tag{2.3.5}$$

其中

$$p=p_1+p_2,p_1+p_2-1,\cdots,|p_1-p_2|. \tag{2.3.6}$$

若 $p_2<p_1$，则 p 共有 $2p_2+1$ 个值；若 $p_1<p_2$,则 p 共有 $2p_1+1$ 个值.

$$P_z=m_p\hbar,\quad m_p=-p,-p+1,\cdots,p-1,p, \tag{2.3.7}$$

$\boldsymbol{P}_1$ 和 $\boldsymbol{P}_2$ 可以分别表示轨道角动量 $\boldsymbol{L}$、自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 或总角动量 $\boldsymbol{J}$.

2.3.2 氢原子能级的精细结构

氢原子的狄拉克方程

对单电子原子,狄拉克方程的近似式为

$$\left[\frac{p^2}{2\mu}+U(r)-\frac{p^4}{8\mu^3c^2}+\frac{1}{2\mu^2c^2}\cdot\frac{1}{r}\cdot\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}-\frac{\hbar^2}{4\mu^2c^2}\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right]\Psi$$
$$=E\Psi. \tag{2.3.8}$$

上式方括号中前两项之和为非相对论方程中的哈密顿量,可以用 H_0 表示;第四项为自旋轨道相互作用项,用 ΔH_{ls}表示;第三项反映了质量随速度变化的影响,用 ΔH_m表示,这可以由下式看出，

$$E'=E-\mu c^2=\sqrt{c^2p^2+\mu^2c^4}-\mu c^2$$

$$= \mu c^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{\mu^2 c^2}} - \mu c^2 \approx \frac{p^2}{2\mu} - \frac{p^4}{8\mu^3 c^2}. \tag{2.3.9}$$

第五项是狄拉克方程所特有的，一般称为达尔文项，用 ΔH_d 表示. 狄拉克方程可以简写作：

$$[H_0 + \Delta H_m + \Delta H_{ls} + \Delta H_d]\Psi = E\Psi, \tag{2.3.10}$$

H_0 可以看作零级近似哈密顿量，ΔH_m、ΔH_{ls}和 ΔH_d 对能量的贡献都很小，可以看作微扰.

氢原子能级的精细结构

按照微扰论计算的结果：

$$\Delta E_m = -\frac{R_H hc}{n^2}\frac{\alpha^2}{n}\left[\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n}\right], \tag{2.3.11}$$

$$\Delta E_d = -\begin{cases} \dfrac{R_H hc}{n^2}\dfrac{\alpha^2}{n}, & \text{当 } l = 0 \text{ 时}, \\ 0, & \text{当 } l \neq 0 \text{ 时}, \end{cases} \tag{2.3.12}$$

$$\Delta E_{ls} = -\frac{R_H hc}{n^2}\frac{\alpha^2}{n}\frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2l(l+1/2)(l+1)}. \tag{2.3.13}$$

其中 α 为精细结构常数，

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}. \tag{2.3.14}$$

总结各种情况，总的微扰能量可以写成

$$\begin{aligned} \Delta E_{FS} &= \Delta E_m + \Delta E_d + \Delta E_{ls} \\ &= -\frac{R_H hc}{n^2}\frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right). \end{aligned} \tag{2.3.15}$$

考虑到精细结构，氢原子能级公式为

$$E_H = E_n + E_{FS} = -\frac{R_H hc}{n^2} - \frac{R_H hc}{n^2}\frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right). \tag{2.3.16}$$

由于碱金属原子的 ΔH_m 和 ΔH_d 对能量的微扰修正比 ΔH_{ls}的贡献小得多，因此主要考虑 ΔH_{ls}的微扰修正对能级精细结构的影响.

例题 2.3.1 根据公式 (2.3.15)，计算氢原子主量子数 $n=1,2,3$的精细结构的微扰能量，画出相应的原子态能级示意图.

解 根据公式 (2.3.15)

$$\Delta E_{FS} = -\frac{R_H hc}{n^2}\frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+1/2}-\frac{3}{4n}\right) = -\frac{B}{n^3}\left(\frac{1}{j+1/2}-\frac{3}{4n}\right)$$

当 $n=1$ 时，只有原子态$^2S_{1/2}$，精细结构微扰能量为 $\Delta E_{FS} = -\frac{B}{4}$；

当 $n=2$ 时，有原子态$^2S_{1/2}$、$^2P_{1/2}$和$^2P_{3/2}$，

对于$^2S_{1/2}$和$^2P_{1/2}$有相同的精细结构微扰能量，$\Delta E_{FS} = -\frac{5B}{64}$，

对于$^2P_{3/2}$精细结构微扰能量为 $\Delta E_{FS} = -\frac{B}{64}$；

当 $n=3$ 时，有原子态$^2S_{1/2}$、$^2P_{1/2}$、$^2P_{3/2}$，$^2D_{3/2}$和$^2D_{5/2}$，

对于$^2S_{1/2}$和$^2P_{1/2}$有相同的精细结构微扰能量，$\Delta E_{FS} = -\frac{3B}{108}$，

对于$^2P_{3/2}$和$^2P_{3/2}$有相同的精细结构微扰能量，$\Delta E_{FS} = -\frac{B}{108}$，

对于$^2D_{5/2}$精细结构微扰能量为 $\Delta E_{FS} = -\frac{B}{324}$.

相应的原子态能级示意图见图 2.3.1.

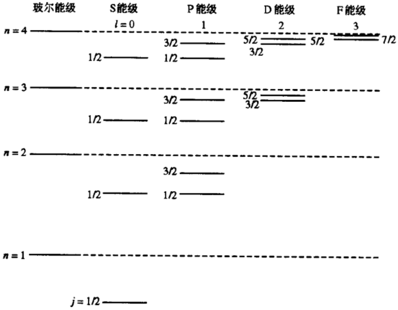


图 2.3.1 氢原子能级的精细结构①

① 未按精确比例.

2.3.3 多电子原子能级的精细结构

内部满壳层作用

内层电子构成满壳层结构时，根据泡利原理，满壳层中每个满支壳层中电子的轨道磁量子数 m_l 分别取 $l,l-1,\cdots,0,-1,\cdots,-l$；自旋磁量子数取 1/2 和 $-1/2$，因此，$\sum m_l=0$，$\sum m_s=0$，这样满支壳层总的轨道磁矩和自旋磁矩都是零. 因为满壳层电子的总轨道角动量和总自旋角动量为零，所以和价电子不发生磁相互作用. 设满壳层之外另外有几个价电子，假定价电子不影响满壳层电荷的球对称性，这时满壳层电子的作用相当于起了一种屏蔽作用，使核电荷对价电子的吸引力减弱了. 价电子除相互之间的静电斥力外，总的仍然受到一个有心力场的作用，这对价电子的总能量是有影响的. 价电子的自旋量子数、轨道量子数等只由价电子之间的相互作用决定，不受满壳层的影响. 它与内部满壳层电子之间没有角动量的耦合作用. 一般只须考虑外层价电子之间的各种耦合作用. 以后讨论电子之间的相互作用都是指外层价电子之间的相互作用.

多电子原子

零级近似的本征方程只和每个电子的坐标有关，可以分离成单个电子的方程，和氢原子类似，每个电子的状态可以用一组量子数 n,l,m_l,m_s 描述. 进一步考虑剩余非有心排斥静电势和磁相互作用时，原子的能级要复杂一些.

通常用小写字母 l、s、j 等表示单个电子的角动量量子数；用大写字母 L、S、J 等表示整个原子中电子的总角动量量子数；对于单电子的轨道量子数 l 对应的能级分别用相应的小写字母表示：

l：	0	1	2	3	4	5
	s	p	d	f	g	h

对于整个原子中电子的总轨道角动量量子数 L 取值不同的能级，用相应的大写字母表示：

L：	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
	S	P	D	F	G	H	I	K	L	M	N	O

当非中心斥力作用的剩余静电势大于自旋轨道耦合,即

$$\sum_{i,j} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}} - \sum_{i=1}^{N} S(r_i) > \frac{1}{2\mu^2 c^2} \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r} \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}, \quad (2.3.17)$$

单个电子的自旋轨道相互作用可以忽略时,它们不能耦合成单个电子的总角动量.每个电子的轨道角动量已不是守恒量.电子与电子之间由于非有心斥力作用而相互联系起来.所有电子的轨道角动量耦合成电子的总轨道角动量,总轨道角动量量子数 L 是守恒量,有确定的物理意义.所有电子的自旋角动量耦合成总自旋角动量,总自旋角动量量子数 S 是守恒量,也有确定的物理意义.所以用 L、S 来表征能态是恰当的.在这种近似下,L 和 S 是好量子数.然后轨道总角动量与自旋总角动量再耦合成总角动量,轨道总角动量和自旋总角动量绕总角动量旋进.这种自旋轨道的耦合方式称为 LS 耦合,也称为 Russell-Saunders 耦合.可以用下式表示

$$(\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{s}_2, \cdots)(\boldsymbol{l}_1, \boldsymbol{l}_2, \cdots) = (\boldsymbol{S}, \boldsymbol{L}) = \boldsymbol{J}. \quad (2.3.18)$$

轻元素的原子核在电子处产生的磁场较弱,自旋轨道相互作用较弱,一般都是 LS 耦合.

与 LS 耦合相反,当电子自身自旋轨道相互作用导致的能级分裂远远大于非有心静电相互作用所导致的分裂,即

$$\sum_{i,j} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}} - \sum_{i=1}^{N} S(r_i) < \frac{1}{2\mu^2 c^2} \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r} \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}, \quad (2.3.19)$$

忽略非有心静电相互作用,先考虑每个电子自身的自旋轨道相互作用,每个电子的总角动量分别近似守恒,相应的每个电子总角动量量子数 $j_1, j_2, j_3, \cdots$ 是好量子数.能级由 $j_1, j_2, j_3, \cdots$ 决定.在此基础上,影响很小的非有心静电相互作用使 $\boldsymbol{j}_1, \boldsymbol{j}_2, \boldsymbol{j}_3, \cdots$ 耦合,能级进一步作微小的分裂,原子的总角动量是守恒的.称为 jj 耦合.可以用下式表示

$$(\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{l}_1)(\boldsymbol{s}_2, \boldsymbol{l}_2)(\boldsymbol{s}_3, \boldsymbol{l}_3)\cdots = (\boldsymbol{j}_1, \boldsymbol{j}_2, \boldsymbol{j}_3, \cdots) = \boldsymbol{J}. \quad (2.3.20)$$

重元素核电荷相对于电子的运动在电子处产生的磁场较强,自旋轨道耦合相对较强,原子中每个电子的自旋角动量与轨道角动量先耦合成电子的总角动量,然后不同电子的总角动量再耦合成总角动量.

2.3.4 LS 耦合

对于 LS 耦合，其耦合规则如下.

三个角动量量子数

首先按照角动量耦合规则确定总自旋量子数 S 和总轨道量子数 L. 然后确定相应的总角动量量子数 J. 若 $S<L$，共有 $2S+1$ 个 J；若 $S>L$，共有 $2L+1$ 个 J. 考虑到 LS 耦合后，电子的量子态不能再用量子数 m_l 和 m_s 描写，或者说，在 LS 耦合的情况下，m_l 和 m_s 不再是好量子数. J 和 m_J 都是好量子数.

原子态的表示

在 LS 耦合下，由于电子之间静电非有心力作用而分裂的能级，以价电子总轨道角动量量子数 L 和总自旋角动量量子数 S 表征，称为原子态，表示为

$$^{2S+1}L. \tag{2.3.21}$$

左上标 $2S+1$ 表示原子多重态的重数，用总自旋量子数表示；中间大写字母表示总轨道角动量量子数 L. 有时在右下标写出总角动量量子数 J：$^{2S+1}L_J$. 原子态有时也称为光谱项或谱项(term).

不等效电子 LS 耦合的原子态

具有不完全相同量子数(n,l)的电子称为不等效电子(non-equivalent electrons)，这些电子 LS 耦合的原子态总结如表 2.3.1：

表 2.3.1

电子组态	原　子　态
ss	$^1S_0$, $^3S_1$
sp	$^1P_1$, $^3P_{2,1,0}$
sd	$^1D_2$, $^3D_{3,2,1}$
pp	$^1S_0$, $^1P_1$, $^1D_2$, $^3S_1$, $^3P_{2,1,0}$, $^3D_{3,2,1}$
pd	$^1P_1$, $^1D_2$, $^1F_3$, $^3P_{2,1,0}$, $^3D_{3,2,1}$, $^3F_{4,3,2}$
dd	$^1S_0$, $^1P_1$, $^1D_2$, $^1F_3$, $^1G_4$, $^3S_1$, $^3P_{2,1,0}$, $^3D_{3,2,1}$, $^3F_{4,3,2}$, $^3G_{5,4,3}$

例题 2.3.2 求由 $l_1=1$ 和 $l_2=2$ 的两个电子(pd 组态)LS 耦合成的原子态.

解 由角动量耦合规则，两个电子的自旋可以耦合成单态 $S=0$ 和三重态 $S=1$. 两个电子的轨道角动量耦合有 $L=1,2,3$，这三个 L 值的原子态分别称为 P、D、F 态. 作表如下表示两个电子(pd 组态) LS 耦合成的原子态：

	$S=0$	1
$L=1$	$^1P_1$	$^3P_{0,1,2}$
2	$^1D_2$	$^3D_{1,2,3}$
3	$^1F_3$	$^3F_{2,3,4}$

等效电子 LS 耦合的原子态

具有完全相同量子数(n,l)的电子称为等效电子(equivalent electrons)，等效电子 LS 耦合的原子态，由于泡利不相容原理的限制，要比不等效电子 LS 耦合的原子态少得多. 两个等效电子 LS 耦合的原子态可以由 $L+S$ 为偶数的偶数定则确定. 即两个电子的总轨道角动量量子数 L 和总自旋角动量量子数 S 之和 $L+S$ 为偶数的原子态，才是两个等效电子允许的原子态.

满壳层的原子态必定为 $S=0,L=0$ 的 $^1S_0$ 态. 此态可以看成是由两部分角动量耦合而成的. 例如由 p^2 和 p^4 组成满壳层 p^6. p^2 和 p^4 的原子态必须相同，才能得到它们的总自旋量子数和总轨道量子数为零. 一般来说 q 个等效电子 LS 耦合的原子态和 $r-q$ 个等效电子的原子态相同，$r=2(2L+1)$为等效电子所在支壳层最多可以容纳的电子总数. 部分等效电子 LS 耦合的原子态如表 2.3.2 所示：

表 2.3.2

电子组态	原 子 态
s^2	^1S
p^2, p^4	$^1S_0$, $^1D_2$, $^3P_{2,1,0}$
p^3	^2P, ^2D, ^4S
p^1, p^5	^2P
p^6	^1S
d^2, d^8	^1S, ^1D, ^1G, ^3P, ^3F
d^3, d^5	^2P, $^2D(2)$, ^2F, ^2G, ^2H, ^4P, ^4F
d^4, d^6	$^1S(2)$, $^1D(2)$, ^1F, $^1G(2)$, ^1I, $^3P(2)$, ^3D, $^3F(2)$, ^3G, ^3H, ^5D
d^5	^2S, ^2P, $^2D(3)$, $^2F(2)$, $^2G(2)$, ^2H, ^2I, ^4P, ^4D, ^4F, ^4G, ^6S

注：括号中的数字表示在相同总自旋量子数情况下不同自旋排列的数目.

朗德间隔定则

朗德(A. Landé)提出：在 LS 耦合中，同一多重态中，二相邻能级间隔之比，等于有关二 J 值中较大值之比. 朗德间隔定则是 LS 耦合多重态遵从的一条规律，它可以用来鉴别是否属于 LS 耦合.

洪德定则

从一个电子组态形成诸能级的上下次序由洪德(F. Hund)定则①决定. 此定则只适用于 LS 耦合：(1) 对一给定的电子组态，能量最低的原子态必定具有泡利原理允许的最大的总自旋量子数 S 值. (2) 相同 S 值的状态中，轨道量子数 L 值最大的能量最低. (3) 对同一支壳层的同科电子，如果电子数不到半满，总角动量量子数 J 越小的能级越低，称为正常次序；半满以上的电子态，总角动量量子数 J 越大的能级越低，称为倒转次序.

原子基态的确定

原子基态(ground state)指原子的能量最低的状态. 处于基态的原子中电子的角动量耦合都属于 LS 耦合. 确定原子基态的主要依据是洪德定则. 可以由原子的基态电子组态，定出它所能形成的原子态，然后再用洪德定则找出能量最低的基态.

例题 2.3.3 确定 $Z=3,6,8$ 元素的基态的电子组态和原子态.

解

(1) 先确定原子基态的电子组态；

${}_3\mathrm{Li}(1s^22s^1)$，　　${}_6\mathrm{C}(1s^22s^22p^2)$，　　${}_8\mathrm{O}(1s^22s^22p^4)$，

(2) 只考虑最外层的价电子；

${}_3\mathrm{Li}(2s^1)$，　${}_6\mathrm{C}(2p^2)$，　${}_8\mathrm{O}(2p^4)$，

(3) 按照基态 LS 耦合确定 L,S,J 和原子态.

${}_3\mathrm{Li}(2s^1)$ 只有一个 2s 电子，半满，故 $m_{s_1}=1/2, S=1/2, L=0, J=1/2$，基态的原子态为 ${}^2S_{1/2}$.

${}_6\mathrm{C}(2p^2)$ 有两个 2p 电子，不到半满，故 $m_{s_1}=1/2, m_{s_2}=1/2, S=$

① N. Karayianis, Physical Basis for Hund's Rule, *Am, J. Phys.* **32**(1964)213; **33**(1965)201.

1，$l=1$，轨道磁量子数可以取的极大值为 $m_{l_1}=1, m_{l_2}=0$，总磁量子数极大值为$m_l=1+0=1$，因此轨道量子数为 $L=1, J=|L-S|=0$，基态的原子态为$^3P_0$.

$_8O(2p^4)$ 有四个 2p 电子，超过半满，故 $m_{s_1}=1/2, m_{s_2}=1/2, m_{s_3}=1/2, m_{s_4}=-1/2, S=1, l=1$，轨道磁量子数可以取的极大值为 $m_{l_1}=1, m_{l_2}=0, m_{l_3}=-1, m_{l_4}=1$，总磁量子数极大值为 $m_l=1+0-1+1=1$，因此轨道量子数为 $L=1, J=|L+S|=2$，基态的原子态为$^3P_2$.

例题 2.3.4　确定 V($Z=23$)、Fe($Z=26$)、Np($Z=93$)原子的基态.

解　$_{23}V$ 基态的电子组态为

$1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^3$，　即$(_{18}Ar)4s^23d^3$.

应用洪德规则 3d 有 3 个电子不到半满.

自旋量子数：$S=\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\times 3$，轨道量子数 $m_l=2+1+0, L=3$.

总量子数：$J=3/2$，不到半满，基态原子态为$^4F_{3/2}$.

$_{26}Fe$ 基态的电子组态为：$1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^6$，即$(_{18}Ar)4s^23d^6$.

3d 有 6 个电子超过半满.

$S=\frac{1}{2}\times 5-\frac{1}{2}=2, m_l=2+1+0-1-2+2=2, L=2$.

$J=4$ 超过半满，基态的原子态为$^5D_4$.

$_{93}Np$ 的基态原子组态为

$[1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}4s^24p^64d^{10}4f^{14}5s^25p^65d^{10}6s^26p^6]5f^46d^17s^2$，即$(_{86}Rn)5f^46d^17s^2$.

对 5f 壳层有 4 个电子不到半满：$S_1=2, L_{5f}=3+2+1+0=6$.

对 6d 壳层有 1 个电子不到半满：$S_2=1/2, L_{6d}=2$.

总量子数 $S=5/2, L=8, j=11/2$，基态为$^6L_{11/2}$.

例题 2.3.5　下列原子态符号中，哪些可以是碱金属原子的原子态？

$1^2S_{1/2}, 2^2S_{1/2}, 2^2S_1, 2^2P_{5/2}, 3^2F_{5/2}, 3^2D_{3/2}, 2^2P_{3/2}, 4^2D_{1/2}$.

解　只有 $2^2S_{1/2}, 3^2D_{3/2}, 2^2P_{3/2}$. 因为 $1^2S_{1/2}$是氢原子的原子态；

2^2S_1，$2^2P_{5/2}$，$3^2F_{5/2}$，$4^2D_{1/2}$原子态不存在.

2.3.5 *jj* 耦合

当电子的自旋-轨道耦合相对较强，而电子自旋-自旋耦合以及轨道-轨道耦合较弱，原子中每个价电子的自旋角动量和轨道角动量矢量首先耦合成单个电子的总角动量，然后不同电子总角动量再耦合成原子的总角动量. 称为 *jj* 耦合. *jj* 耦合一般发生在某些高能激发态和较重的原子中. *jj* 耦合形成的原子态记为

$$(j_1, j_2, \cdots, j_V)_J, \tag{2.3.22}$$

其中 j_1，j_2，…，j_V 分别为第 1，2，…，V 个电子各自的总角动量量子数，J 为所有这些电子的总角动量量子数. 同一种原子组态，不论 *jj* 耦合还是 *LS* 耦合，所能构成的量子态的总数是相同的，两种情况下的 J 值也是一一对应的. 所不同的只是能级间隔不同，这反映了几种相互作用的相对强度不同. 碳族元素的激发态 ps 组态能级结构说明，*LS* 耦合和 *jj* 耦合是两个极端情况，有些能级结构介于二者之间，很难截然分开.

例题 2.3.6 Pb 原子基态的两个电子都在 6p 轨道，若其中一个电子被激发到 7s 轨道，其价电子之间的相互作用属于 *jj* 耦合，则这种电子组态可以形成哪些原子态？

解 6p 电子的 $s=1/2$，$l=1$，$j_p=1/2,\ 3/2$，

7s 电子的 $s=1/2$，$l=0$，$j_s=1/2$，

由 $j_p=1/2$，$j_s=1/2$ 得 $J=0,1$，相应的原子态为 $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)_{0,1}$，

由 $j_p=3/2$，$j_s=1/2$ 得 $J=1,2$，相应的原子态为 $\left(\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right)_{1,2}$.

氢原子和碱金属只有一个价电子，基态时处于 ns 态，其原子态为：$^2S_{\frac{1}{2}}$，处于激发态 np，nd，nf 时的原子态为：$^2P_{\frac{1}{2},\frac{3}{2}}$，$^2D_{\frac{3}{2},\frac{5}{2}}$和$^2F_{\frac{5}{2},\frac{7}{2}}$.

处于激发态的惰性气体元素，有一个电子离开满壳层激发到高能级，形成新的电子组态，这些电子组态根据洪德定则能量形成不同的原子态. 氦原子的基态为 1s1s，原子态为$^1S_0$. 它的激发态是一个电

子留在 1s 态，另一个电子被激发到 2s，2p，3s，3p， 3d，4s，4p，4d，4f，…，ss，sp，sd，sf 电子耦合成的相应的原子态依次为：$^1S_0$ $^3S_1$，$^1P_1$ $^3P_{2,1,0}$，$^1D_2$ $^3D_{3,2,1}$，$^1F_3$ $^3F_{4,3,2}$，…. 这样氦原子的能级结构分成两套：一套是单一结构，一套是三重结构. 其他所有惰性气体元素，有一个电子离开满壳层激发到高能级以后，原来满壳层的原子态和该壳层只有一个价电子时的原子态相同，这个等价的价电子和激发到高能级的价电子 LS 耦合成新的原子态，能级结构仍然是两套：单一结构和三重结构.

两个价电子的原子能级结构类似于氦原子. 如镁基态的电子组态为 3s3s. 它的激发态是一个电子留在 3s 态，另一个电子被激发到 3p，3d，4s，4p，4d，4f，…，ss， sp， sd， sf 电子耦合成的相应的原子态依次为：$^1S_0$ $^3S_1$，$^1P_1$ $^3P_{2,1,0}$，$^1D_2$ $^3D_{3,2,1}$，$^1F_3$ $^3F_{4,3,2}$，…. 这样镁原子的能级结构分成两套：单一结构和三重结构.

2.3.6 原子能级的超精细结构

原子核的角动量和磁矩

原子核是由质子和中子组成的，质子和中子都是自旋为 1/2 的费米子，因此原子核具有自旋角动量 $\boldsymbol{I}$ 和核磁矩 μ_I，原子核的自旋角动量和电子的总角动量 $\boldsymbol{J}$ 之间有相互作用，按照角动量相加规则，原子体系的总角动量为

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{J}, \quad |\boldsymbol{F}| = \sqrt{F(F+1)}\,\hbar,$$
$$F_z = mF\hbar, \quad m_F = F, F-1, \cdots, -F. \qquad (2.3.23)$$

原子核中的电荷有一定的分布，会产生电四极矩，在电子产生的电场梯度下产生电四极相互作用，这两种作用都会使原子能级产生进一步的分裂. 因为其分裂的程度比精细结构还要小，通常称为原子能级的超精细结构. 由于同一元素的不同同位素具有不同的核质量和电荷分布，因而也会引起原子能级的变化，称为同位素位移，其数量级也正好在超精细结构的同一范围内.

磁偶极超精细相互作用

磁偶极超精细相互作用的微扰哈密顿量可以写成

$$\hat{H}_m = A(J)\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{J}, \tag{2.3.24}$$

其中 $A(J)$称为磁超精细相互作用常数. 用微扰矩阵元可以算出 $\hat{H}_m$ 的平均值,即超精细相互作用能量分裂的一般表达式：

$$\Delta E_m = \frac{1}{2}A(J)\{F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)\}. \tag{2.3.25}$$

它决定了超精细结构的一些性质：超精细结构能级主要由原子体系的总角动量 F 来描述;超精细相互作用常数 $A(J)$是能级分裂大小的量度,各超精细结构之间的间距服从

$$\Delta E_m(F) - \Delta E_m(F-1) = A(J)F, \tag{2.3.26}$$

称为超精细能级分裂的间距规则. 相邻能级间距从 $F_{\min} = |I-J|$起到 $F_{\max} = |I+J|$止,随 F 按等差级数增加;不同超精细结构能级之间的电偶极跃迁满足选择定则：

$$\Delta F = 0, \pm 1, \quad \Delta m_F = 0, \pm 1, \tag{2.3.27}$$

磁偶极跃迁满足选择定则：

$$\Delta m_F = \pm 1. \tag{2.3.28}$$

超精细相互作用除了引起原子能级的超精细结构外,在原子核内部也会有所反映.

电四极超精细相互作用

当原子核电荷分布偏离球对称时,原子核中存在电四极矩 Q,核电四极矩在核外电子云存在电场梯度$\frac{\partial^2 V_e}{\partial z^2}$情况下,将会产生电四极超精细相互作用,从而引起一个附加的相互作用能：

$$\Delta E_Q = \frac{B}{4}\,\frac{\frac{3}{2}K(K+1) - 2I(I+1)J(J+1)}{I(2I-1)J(2J-1)}, \tag{2.3.29}$$

其中

$$B = eQ\left\langle\frac{\partial^2 V_e}{\partial z^2}\right\rangle, \tag{2.3.30}$$

$$K = F(F+1) - J(J+1) - I(I+1). \tag{2.3.31}$$

同位素移动

同一种元素的不同同位素,即使不考虑超精细结构,由于原子核质量不同,其有效里德伯常数会产生差异,相应的原子能级会发生移动. 轻元素的同位素移动很明显,而这种效应随着原子量的增大而迅

速减小. 但是原子量增大时,核的体积的影响逐步显著起来,这对原子核所在处的电场分布产生影响,使之偏离点电荷和库仑场. 不同的元素这种影响不同,使原子能级有微小的差异. 总起来,这两种因素导致了原子能级的同位素移动.

激光分离同位素①

原子能级的同位素移动可以用于同位素分离. 用一束单色性极好、频率为 ν_1、功率很大的激光束照射含各种同位素的天然元素,由于单色性好,功率很大,它使所有希望分离出来的同位素原子都被激发到某一激发态,而其余所有同位素原子仍然处于基态. 同时用第二束激光照射,选择光子的能量 $h\nu_2$,只要不使其他同位素原子产生共振激发,但是又大于希望分离出来的同位素原子从激发态到电离态的能量,就能使所有希望分离出来的同位素原子全部被电离,然后通过施加电场或用化学方法将其分离出来.

目前在国际上已有很多实验室致力于激光分离同位素的研究,它对 H 和 D、^{6}Li 和^{7}Li、以及^{235}U 和^{238}U 的分离都有实际意义.

2.3.7 守恒量和好量子数

力学量平均值随时间的变化

在波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$所描写的量子态中,力学量 A 的平均值为

$$\overline{A} = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\hat{A}\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}\tau. \qquad (2.3.32)$$

因为 $\psi(\boldsymbol{r},t)$是时间的函数,$\hat{A}$ 也可能显含时间,所以 $\overline{A}$ 通常是时间 t 的函数,可以证明它对时间的微商为

$$\frac{\mathrm{d}\overline{A}}{\mathrm{d}t} = \overline{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{A},\hat{H}]}, \qquad (2.3.33)$$

如果力学量 $\hat{A}$ 不显含时间,又与 $\hat{H}$ 对易,则

$$\overline{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}} = 0, \quad \frac{\mathrm{d}\overline{A}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{A},\hat{H}]} = 0. \qquad (2.3.34)$$

---

① 胡树发、申立国、林学敏,化学与粘合,1999 年第 1 期,32 页;宁西京、林福成、景春阳,光学学报,**18**(1998)431;李学信,中国激光,科学出版社,1997.

即力学量 $\hat{A}$ 的平均值不随时间改变，力学量 A 称为体系的一个守恒量.

好量子数

量子体系的守恒量，无论在什么状态下，其平均值和几率分布都不随时间改变. 如果初始时刻体系处于守恒量 A 的本征态，则随时间的推移，体系将保持在该状态，守恒量 A 总是具有确定值. 在这种情况下，守恒量 A 的量子数称为好量子数. 量子体系的各守恒量，并不一定都可以同时取确定值. 例如在中心力场中运动的粒子的轨道角动量 L，它的三个分量都是守恒量，但是由于 $\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$ 和 $\hat{L}_z$ 互不对易，因此除 $L=0$ 的 S 态外，它们不能同时取确定值.

自由粒子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}, \tag{2.3.35}$$

显然有

$$[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}] = 0, \quad [\hat{\boldsymbol{L}},\hat{H}] = 0, \tag{2.3.36}$$

因此自由粒子的动量和轨道角动量都是守恒量.

在中心力场中运动的粒子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U(r), \tag{2.3.37}$$

显然有

$$[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}] \neq 0, \quad [\hat{\boldsymbol{L}},\hat{H}] = 0, \tag{2.3.38}$$

因此在中心力场中运动的粒子的轨道角动量都是守恒量，而动量则不是守恒量.

在氢原子中如果只考虑中心力场近似，则轨道角动量是守恒量. 如果考虑非有心力场和磁相互作用，则体系的哈密顿量中增加非有心力场和磁相互作用的微扰项，轨道角动量不再是守恒量，但是没有考虑电子体系和其他粒子的相互作用，因此其总角动量是守恒量. 如果考虑电子体系和原子核之间的相互作用，则电子体系的总角动量不再是守恒量，原子的总角动量是守恒量. 这些守恒量相应的量子数是好量子数.

习　题

2.3.1　求由两个电子 ss 组态、sp 组态、pp 组态、pd 组态和 dd 组态 LS 耦合成的原子态.

2.3.2　写出两个等效 p 电子或两个等效 d 电子可能形成的原子态.

2.3.3　对于多电子原子，在 LS 耦合近似下，自旋轨道相互作用项可以写成 $U_{so}=\xi(L,S)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$，于是，$U_{so}$引起的能级移动可以写成

$$E_J=\frac{1}{2}\xi(L,S)[J(J+1)-L(L+1)-S(S+1)],$$

试由此推出朗德间隔定则.

2.3.4　已知某原子的某能级的多重结构两个相邻能级间隔比为 5∶3，试由朗德间隔定则确定这些能级的原子态.

2.3.5　确定 Sc($Z=21$)、Sr($Z=38$)、U($Z=92$)原子的基态的电子组态和原子态.

2.3.6　写出下列各原子态的 S、L、J 值，并指出这些原子态中哪些是可能的？哪些是不可能的？

$$^2S_{3/2},\ ^3D_0,\ ^5P_3,\ ^4F_2,\ ^2G_{7/2}.$$

2.4　能级跃迁

2.4.1　辐射跃迁

电偶极跃迁

电偶极跃迁是电子吸收或放出光子，其能量在不同的原子能级之间变化. 先考虑吸收光子的情况. 假设入射光为平面单色光，其电场强度为

$$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_0\cos(\omega t-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}),\qquad(2.4.1)$$

其中 $\boldsymbol{k}$ 为光的波矢，在原子中，电子的速度 v 远小于光速 c，在没有外加恒定磁场的情况下，光波中磁场对电子的作用远小于电场对电子的作用：

$$\frac{|e\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}|}{|e\boldsymbol{E}|}\sim\frac{v}{c}\ll1,\qquad(2.4.2)$$

因此只需要考虑电场的作用. 这个电场对电子的作用存在于原子中电子运动的空间，$\boldsymbol{r}$ 的变化范围为原子的线度，远小于光波波长 λ，因此电场在空间变化极小. 可以看成是均匀电场：

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0\cos\omega t, \tag{2.4.3}$$

电子在此电场中的势能为

$$H' = - e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}, \tag{2.4.4}$$

由于电磁波中的电场 $\boldsymbol{E}$ 远小于原子内部的电场(约为 10^{11} V/m)，H' 远小于电子在原子中的势能，因此可以看作是对电子哈密顿算符的含时微扰：

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t), \tag{2.4.5}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}'(t) &= - e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\\ &= - \boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{E}_0\cos\omega t = \hat{F}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}).\end{aligned} \tag{2.4.6}$$

由含时微扰理论得到，只有当 $\omega\sim\pm\omega_{mk}[\omega_{mk}=(E_m-E_k)/\hbar]$时才有显著跃迁. 例如原子吸收光的跃迁，只有当入射光的频率 $\omega\sim\omega_{mk}$时，才对跃迁有显著贡献.

跃迁几率

入射光的频率 $\omega\sim\omega_{mk}$时，跃迁几率为

$$\begin{aligned}W_{k\to m} &= \frac{\pi|F_{mk}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2[(\omega_{mk}-\omega)t/2]}{[(\omega_{mk}-\omega)/2]^2}\\ &= \frac{2\pi t}{\hbar}|F_{mk}|^2\delta(E_m - E_k \pm \hbar\omega),\end{aligned} \tag{2.4.7}$$

其中

$$F_{mk} = \int\phi_m^*\hat{F}\phi_k\mathrm{d}\tau. \tag{2.4.8}$$

因此单位时间内的跃迁几率为

$$w_{k\to m} = \frac{2\pi}{\hbar}|F_{mk}|^2\delta(E_m - E_k \pm \hbar\omega). \tag{2.4.9}$$

2.4.2 电偶极跃迁选择定则

量子系统从一个定态到另一个定态的改变称为跃迁(transition). 这种跃迁可以是自发从高能态跃迁到低能态，也可以在外界的干扰下发生. 引起跃迁的扰动，可以是原子间的碰撞，也可以是电子、光子等粒子和原子的碰撞. 原子由于发射或吸收光子引起

的跃迁，称为辐射跃迁.

由于光子具有能量和角动量，所以原子的辐射跃迁必须满足一定的条件，也就是跃迁过程中各种守恒定律对能够发生跃迁的两个定态的限制和选择，称为选择定则(selection rule). 对原子体系，主要有能量守恒、宇称守恒和角动量守恒. 符合选择定则的跃迁称为允许跃迁(allowed transition)，违背选择定则的跃迁称为警戒跃迁(forbidden transition). 警戒跃迁并非绝对不可能发生，只是电偶极辐射跃迁被禁止，其他跃迁过程，如原子间的碰撞跃迁、磁偶极跃迁等仍然可以发生. 即使对于电偶极跃迁，在特殊情况下，也有可能发生.

原则上光子的总角量子数可以等于任何正整数，但是最重要的是 $j=1$ 的状态. 电磁辐射可以分解成偶极辐射、四极辐射、八极辐射等，它们分别对应于 $j=1,2,3,\cdots$ 的光子场. 通常 $j=1$ 的偶极辐射最强，其他多极辐射随级次 j 的增高而急剧减少，从而可以忽略不计.

能量守恒要求辐射光子能量与跃迁能级之间满足量子化条件：

$$\omega_{mk}=\frac{1}{\hbar}(E_m-E_k), \tag{2.4.10}$$

这个条件是对光子频率的限制，而不是对能级主量子数 n 的限制. 对主量子数 n 没有选择定则.

拉波特定则

从宇称守恒考虑，原子中每个电子的宇称由球谐函数的性质可得

$$\psi_{nlm}(-\boldsymbol{r})=(-1)^{l_i}\psi_{nlm}(\boldsymbol{r}), \tag{2.4.11}$$

式中$(-1)^{l_i}$称为在此量子态电子的宇称，由轨道量子数决定. 多电子原子系统的宇称为

$$(-1)^{l_1}(-1)^{l_2}\cdots(-1)^{l_n}=(-1)^{\sum l_i}. \tag{2.4.12}$$

值得强调的是：原子态的宇称，不是由原子态的总角动量量子数决定的，而是由形成该原子态的电子组态中各电子的轨道角动量量子数，根据 (2.4.12) 式确定的. 因为电场 $\boldsymbol{E}$ 是极矢量，磁场 $\boldsymbol{B}$ 是轴矢量. 在空间反射变换$(x,y,z)\to(-x,-y,-z)$，电场 $\boldsymbol{E}\to-\boldsymbol{E}$，而磁场不变 $\boldsymbol{B}\to\boldsymbol{B}$. 因此在电偶极辐射中光子态是它本征值为$-1$ 的

本征态，在磁偶极辐射中光子态是它本征值为$+1$的本征态. 在电偶极跃迁中，根据宇称守恒，能级之间的跃迁应满足宇称奇偶改变的原则，这就是拉波特定则.

量子数选择定则

由微扰矩阵元的计算和球谐函数的性质可得单电子原子跃迁的选择定则

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta j = 0, \pm 1 \quad (0 \to 0 \text{ 除外}), \qquad (2.4.13)$$

对多电子原子 LS 耦合，由于电偶极矩算符与自旋无关，作用在始态上不改变它的自旋量子数，始末态的自旋量子数必须相同. 允许跃迁为①

$$\Delta S = 0, \quad \Delta L = 0, \pm 1, \quad \Delta J = 0, \pm 1 (0 \to 0 \text{ 除外}). \qquad (2.4.14)$$

原子在外磁场中能级要进一步分裂，这时除上述三个量子数条件外，还有$\Delta m = 0, \pm 1$，当$\Delta J = 0$时$0 \to 0$除外.

对多电子原子 jj 耦合，允许跃迁为

$$\begin{cases}\Delta j_1 = 0, \\ \Delta j_2 = 0, \pm 1,\end{cases} \quad \text{或} \quad \begin{cases}\Delta j_1 = 0, \pm 1, \\ \Delta j_2 = 0,\end{cases}$$

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (0 \to 0 \text{ 除外}). \qquad (2.4.15)$$

电偶极跃迁的辐射场的偏振为

$$\Delta m = 0(\pi), \quad \Delta m = \pm 1(\sigma), \qquad (2.4.16)$$

其中π表示光子在与磁场垂直的方向上具有角动量$\hbar$，σ^+表示光子在与磁场相同的方向上具有角动量$\hbar$，σ^-表示光子在与磁场相反的方向上具有角动量$\hbar$.

电子组态指原子各个壳层中的电子个数，或者说是各个电子所处的壳层. 粗略地讲，它源于原子核与电子的电相互作用，区分了核与电子的作用模式. 电子组态指明了原子中每个电子所处的轨道，从而也决定了每个电子和原子的宇称. 原子态指电子之间、以及轨道与自旋间相互作用的可能模式.

从能量角度讲，电子组态反映的是核与电子的电相互作用，而原

① 张启仁，量子力学，高等教育出版社，1989，275 页.

子态反映的是电子间的相互作用以及电子与核的磁相互作用，不同电子组态间的能量差(能级粗结构)远大于相同电子组态的不同原子态的能量差(精细结构).

原子的宇称由原子的电子组态确定. 显然同一电子组态的不同原子态之间不能有电偶极跃迁. 由 $\Delta S=0$ 可知，不同多重态之间的电偶极跃迁也是禁戒的. 镁原子和汞原子光谱中出现的三重态到单态之间的跃迁是由于自旋-轨道耦合不完全是 LS 耦合引起的. 多电子原子中的电偶极跃迁 ΔL 可以等于零，不违反拉波特定则. 因为这里的 L 是耦合后的总轨道角动量量子数，不决定原子的宇称，决定原子宇称的仍然是电子组态中各电子的轨道量子数.

原子在外磁场中能级要进一步分裂，这时除上述三个量子数条件外，还有 $\Delta m=0,\pm 1$，当 $\Delta J=0$ 时 $0\to 0$ 除外.

2.4.3 磁偶极跃迁选择定则①

磁共振是电磁波中磁场分量和原子中感生磁偶极矩相互作用产生的. 在这种过程中电子在不同原子能级之间的跃迁通常称为磁偶极跃迁. 在磁偶极辐射中光子的角动量为 1，宇称为 1，磁偶极跃迁的选择定则与电偶极跃迁不同，在 LS 耦合下为：

$$\Delta n = 0,\quad \Delta L = 0,\quad \Delta S = 0,$$
$$\Delta J = 0, \pm 1,\quad \Delta m_J = 0, \pm 1. \tag{2.4.17}$$

由于前面三个条件的限制，磁偶极跃迁只能在能级的精细结构子能级及其磁子能级之间发生. 例如在 ^2P 分裂成的 $^2P_{3/2}$ 与 $^2P_{1/2}$ 之间的跃迁，以及各磁子能级之间的跃迁. 当有超精细结构时，磁偶极跃迁可以在超精细结构各子能级之间发生. 因此磁偶极跃迁两能级之间的能量差远小于电偶极跃迁两能级之间的能量差，由于频率比较低，在微波到更低频的电磁波范围内. 磁偶极跃迁的辐射场的偏振为

$$\Delta m = 0(\sigma),\quad \Delta m = \pm 1(\pi), \tag{2.4.18}$$

与电偶极跃迁正好相反.

例题 2.4.1 讨论氖原子电子组态 $2p^5 5s$ 和 $2p^5 3p$ LS 耦合形成

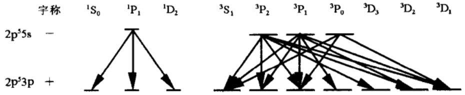
---

① 张启仁，量子力学，高等教育出版社，1989，275 页.

的原子态，以及这些原子态之间可能发生的电偶极跃迁.

解　$2p^5 5s$ LS 耦合形成的原子态为：$^1P_1$，$^3P_{2,1,0}$

$2p^5 3p$ LS 耦合形成的原子态为：$^1S_0$，$^1P_1$，$^1D_2$，$^3P_{2,1,0}$，$^3D_{3,2,1}$



共 18 种可能的电偶极跃迁. 注意，这里出现很多 $\Delta L=0$ 的情况，不违反宇称守恒.

2.4.4 发射和吸收

发射和吸收系数

1917 年爱因斯坦提出了辐射的发射和吸收理论①，用清晰的物理概念简洁地给出了受激辐射、自发发射和吸收系数之间的关系，对激光技术的诞生和应用提供了理论基础. 考虑两个原子能级 E_k 和 $E_m(E_m>E_k)$，在这两个能级之间发生跃迁时，可能发射和吸收的辐射频率 ω_{mk} 由量子化条件决定：

$$\hbar\omega_{mk} = E_m - E_k = h\nu_{mk}. \tag{2.4.19}$$

原子体系从高能级到低能级的跃迁分为两种：自发发射和受激发射. 原子体系从低能级到高能级的跃迁，只发生在吸收提供能量的情况下. 设单位体积内某时刻 t 时，处于能级 E_k 和 E_m 的原子数分别为 N_k 和 N_m，对于自发发射，跃迁几率显然正比于 N_m：

$$\frac{dN_m}{dt} = -\frac{dN_k}{dt} = -A_{mk}N_m, \tag{2.4.20}$$

其中比例常数 A_{mk} 称为自发发射系数. 对于受激发射跃迁几率不仅正比于 N_m，而且正比于辐射场单位频率范围内的能量密度 $\rho(\nu_{mk}, T)$，还依赖于辐射场的温度：

$$\frac{dN_m}{dt} = -\frac{dN_k}{dt} = -B_{mk}N_m\rho(\nu_{mk},T), \tag{2.4.21}$$

① A. Einstein, *Phys. Zeit.*, **18**(1917)121.

其中比例常数 B_{mk} 称为受激发射系数. 对于吸收，类似地有

$$\frac{\mathrm{d}N_m}{\mathrm{d}t}=-\frac{\mathrm{d}N_k}{\mathrm{d}t}=C_{km}N_k\rho(\nu_{mk},T). \tag{2.4.22}$$

当外场不存在时，只发生自发发射：

$$N_m=N_{m0}\mathrm{e}^{-A_{mk}t}. \tag{2.4.23}$$

原子保持在激发态 E_m 上的平均时间为

$$\tau=\frac{1}{N_{m0}}\int_{N_{m0}}^{0}t\,|\mathrm{d}N_m|=\int_0^{\infty}t\mathrm{e}^{-A_{mk}t}A_{mk}\mathrm{d}t=\frac{1}{A_{mk}}, \tag{2.4.24}$$

τ 称为激发态的平均寿命，即激发态上的原子数减少到原来的 1/e 所经历的时间. 当外场作用时，三种过程都可能发生，则

$$\begin{aligned}-\frac{\mathrm{d}N_m}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}N_k}{\mathrm{d}t}&=A_{mk}N_m+B_{mk}N_m\rho(\nu_{mk},T)-C_{km}N_k\rho(\nu_{mk},T)\\&=P_{\mathrm{em}}N_m-P_{\mathrm{ab}}N_k,\end{aligned} \tag{2.4.25}$$

其中

$$P_{\mathrm{em}}=A_{mk}+B_{mk}\rho(\nu_{mk},T),\quad P_{\mathrm{ab}}=C_{km}\rho(\nu_{mk},T), \tag{2.4.26}$$

分别代表单位时间每个原子的发射几率和吸收几率. 对于稳态：

$$\frac{\mathrm{d}N_m}{\mathrm{d}t}=0,$$

因此

$$\frac{P_{\mathrm{ab}}}{P_{\mathrm{em}}}=\frac{N_m}{N_k}=\frac{C_{km}\rho(\nu_{mk},T)}{A_{mk}+B_{mk}\rho(\nu_{mk},T)}. \tag{2.4.27}$$

由麦克斯韦-玻尔兹曼分布律可知：

$$N_k=g_k\mathrm{e}^{-\frac{E_k}{kT}},\quad N_m=g_m\mathrm{e}^{-\frac{E_m}{kT}}, \tag{2.4.28}$$

其中 g_k, g_m 为分别是能级 E_k, E_m 的简并度. 因此

$$\frac{N_k}{N_m}=\frac{g_k}{g_m}\mathrm{e}^{-\frac{E_k-E_m}{kT}}=\frac{g_k}{g_m}\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega_{mk}}{kT}}. \tag{2.4.29}$$

因此

$$\begin{aligned}\rho(\nu_{mk},T)&=\frac{A_{mk}}{\frac{N_k}{N_m}C_{km}-B_{mk}}\\&=\frac{A_{mk}g_m}{C_{km}g_k}\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega_{mk}}{kT}}-\frac{g_m}{g_k}\frac{B_{mk}}{C_{km}}},\end{aligned} \tag{2.4.30}$$

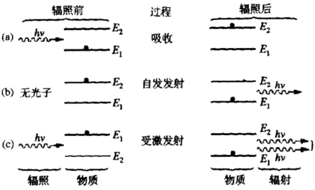


图 2.4.1 吸收、自发发射和受激发射

考虑温度 T 很高时，

$$\rho(\nu_{mk},T)=\frac{A_{mk}g_m}{C_{km}g_k}\frac{1}{1+\frac{h\nu_{mk}}{kT}-\frac{g_m}{g_k}\frac{B_{mk}}{C_{km}}},\qquad(2.4.31)$$

此式应该和瑞利-金斯公式

$$\rho(\nu,T)=\frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT\qquad(2.4.32)$$

一致，因此必须有

$$B_{mk}g_m=C_{km}g_k,\qquad(2.4.33)$$

$$\frac{B_{mk}g_m}{C_{km}g_k}=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}.\qquad(2.4.34)$$

将这两个等式代入任意温度下的 $\rho(\nu_{mk},T)$ 表达式，

$$\rho(\nu,T)=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1},\qquad(2.4.35)$$

这就是黑体辐射的普朗克定律.

2.4.5 激光原理

激光原理

在热平衡时，高能级上的原子数小于低能级上的原子数，总是受激吸收超过受激发射，不能产生净的受激发射. 为了产生净的受激发射，必须设法使能量较高能级上的原子数大于能量较低能级上的原子数：$N_m>N_k(E_m>E_k)$，通常称这种情况为粒子数反转. 在气体激光器中常采用放电激励的方法；在固体或染料激光器中用脉冲光源

照射激光工作物质，称为光激励.

各种使粒子数反转的激励方法统称为泵浦或抽运.处于高能级的原子通过各种途径跃迁到低能级，高能级原子数逐渐减少，低能级原子数逐渐增加，要保持 $N_m > N_k$，不断地得到激光输出，就必须不断地泵浦，补充处于高能级的原子.可以在一个三能级原子或四能级原子中选择产生激光的亚稳态的高能级和产生激光光子的跃迁末态（见图 2.4.2）.

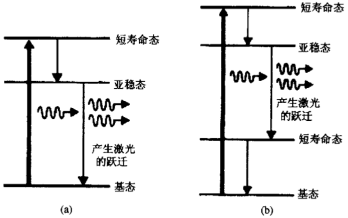


图 2.4.2　激光原理　(a) 三能级原子；(b) 四能级原子.

氦氖激光器

将一定比例的氦气和氖气封入抽成真空的玻璃管中，用气体放电的方法使氦原子中的一个电子从基态激发到 2s 态，形成两个新的相当稳定的谱项：$^1S_0$ 和 $^3S_1$，电子在这两个能态上的寿命很长，不会很快跃迁回基态.

这些处于亚稳态的氦原子和基态氖原子发生碰撞时，将能量传递给氖原子后返回基态，使氖原子有一个 2p 电子激发到 3s，3p，4s，4p，5s，形成五种新的电子组态.内部满壳层 $1s^2 2s^2$ 不影响原子态的形成，只考虑外面不满壳层.氖原子的基态为 $^1S_0$，$2p^5 ns(n=3,4,5)$ 三种电子组态是同类型的，5 个等效 p 电子只组成一个 2p 态，相当于一个电子.这个态又和 s 电子耦合组成谱项：$^1P_1$ 和 $^3P_{0,1,2}$.同氦原子的亚稳态 $^1S_0$ 能量相近的是氖原子 $2p^5 5s$ 电子组态形成的 $^1P_1$ 和 $^3P_{0,1,2}$；同氦原子的亚稳态 $^3S_1$ 能量相近的是氖原子 $2p^5 4s$ 电子组态

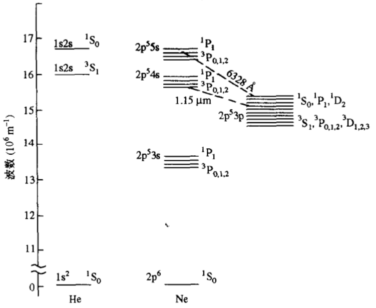


图 2.4.3 氦氖能级图

形成的$^1P_1$和$^3P_{0,1,2}$. 氖原子的另两组激发态的电子组态 $2p^53p$ 和 $2p^54p$,形成 10 个谱项: $^1S_0$, $^1P_1$, $^1D_2$, $^3S_1$, $^3P_{0,1,2}$, $^3D_{1,2,3}$. 氖原子受氦原子亚稳态能量激发,到达 $2p^54s$ 和 $2p^55s$ 电子组态的数目很多,使这两个组态的原子数超过能量较低的 $2p^53p$ 和 $2p^54p$ 的原子数,形成原子数反转. 这样就很容易发生从 $2p^55s$ 到 $2p^53p$ 和 $2p^54p$ 的辐射跃迁,形成 6328 Å 和 3.39 μm 激光. 从 $2p^54s$ 到 $2p^53p$ 形成 1.15 μm 激光,在可见光范围主要是 6328 Å 红光.

产生激光的基本条件除了粒子数反转,还有谐振腔和阈值条件. 谐振腔的作用是使受激辐射的光来回反射,引起新的更多的受激辐射,使光的增益大于损耗,这就是产生激光的阈值条件. 图 2.4.4 显示激光放电管放在由两个凹面反射镜 M_1 和 M_2 组成的法布里-珀罗腔内,管的两端是对 6328 Å 光成布儒斯特角的窗片 W,设置布儒斯特窗是使激光的平行偏振分量通过时反射率为零,以减少腔内部的损耗. 因此,能产生偏振的光也是平行偏振的光,其他偏振的光在通过布儒斯特窗时受到的损耗大,不能起振. 两镜之间的距离等于两镜相同的曲率半径,通常称为共焦腔. 腔的 Q 值足够大,而激光的频宽

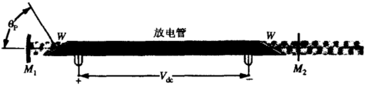


图 2.4.4 氦氖激光器

与 Q 值成反比，因此氦氖激光器波长 6328 Å 的谱线宽度只有 2×10^{-8} Å，单色性非常好. 光波在两镜之间来回反射，形成驻波，两个反射镜中有一个可使光部分透过. 透过的光就是输出的激光. 激光的方向性很好，一般激光器的发散角都接近于该激光器出射孔径 d 所决定的衍射极限：λ/d，λ 为激光波长，氦氖激光器的发散角可以小到 10^{-3} rad.

习 题

2.4.1 考虑精细结构后，画出锂原子由 3D 态返回 2S 态时所有可能的电偶极跃迁.

2.4.2 画出 Li^{++} 离子主量子数 $n=2$ 和 $n=3$ 的精细结构能级图及可能的跃迁. 计算其中最大的波数和最小的波数.

2.4.3 如果镁原子中有一个电子被激发到 3d 态，按 LS 耦合可形成哪些谱项？写出有关的谱项符号. 从这些原子态向低能态跃迁时，可以产生几条光谱线？

2.4.4 铍原子基态的电子组态是 $2s^2$，若其中有一个电子被激发到 3p 态，按 LS 耦合可形成哪些原子态？写出有关的原子态符号. 从这些原子态向低能态跃迁时，可以产生几条光谱线？

2.5 原 子 光 谱

2.5.1 光谱的产生和分类

光谱是电磁辐射的波长成分和强度分布的记录，有时只是波长成分的记录.

光谱仪

用光谱仪可以将光按波长成分展开.把不同成分的强度记录下来,或者将按波长展开后的光谱摄成图象,后一种称为摄谱仪.传统的光谱仪用棱镜或光栅作为分光器,典型的棱镜摄谱仪工作原理如图 2.5.1 所示.

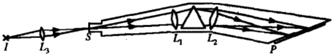


图 2.5.1 棱镜摄谱仪示意图

光源 I 发出的光经透镜 L_3 会聚在摄谱仪的光缝 S 上,一部分进入摄谱仪,经透镜 L_1 后成为平行光,落在三棱镜的一个斜面上,穿过三棱镜后,不同波长的光线以不同的偏转角射出,经过透镜 L_2 再成为会聚光线,不同波长的光线会聚在底片 P 上的不同位置,在 P 上形成一系列光缝 S 的实像.S 是一条窄缝,所以这些实像是细线,成为一系列的谱线.根据谱线的位置可以推算其波长.研究光谱用的光源,除自然光外,传统的有火焰、高温炉、电弧、火花放电、气体放电、化学发光和荧光等.现在采用频率准确可调的激光器.

发射光谱和吸收光谱

光源发出的光谱称为发射光谱.如果将要研究的样品放在连续光谱的光源与光谱仪之间,使来自光源的光先通过样品,然后再进入光谱仪,这样一部分波长的光被样品吸收,所得到的光谱在连续光谱的背景上有一系列被吸收波长的暗线,其负片呈现出连续的暗背景上有一系列的亮线,这就是吸收光谱.样品可以是气体、液体和固体.

谱线宽度

除去因几条谱线波数相差很小而难以分辨的因素外,任何原子光谱的谱线都有一定的宽度.谱线宽度主要由其自然宽度、碰撞增宽(压强增宽)、有限作用时间的增宽和多普勒增宽决定.

谱线的自然宽度是由于原子能级有一定的自然宽度造成的.电子在某一能级上的平均寿命 τ 为自发发射系数 A_{mk}的倒数:

$$\tau = \frac{1}{A_{mk}}. \qquad (2.5.1)$$

能级的自然宽度 ΔE 和平均寿命满足不确定关系：$\tau\Delta E \geqslant \frac{\hbar}{2}$，因此从自然宽度为 ΔE 的激发态跃迁到基态的谱线的频率宽度为

$$\Delta\omega = \frac{\Delta E}{\hbar}. \tag{2.5.2}$$

而在由较高的激发态向较低的激发态跃迁中，谱线的自然宽度取决于这两个能级的自然宽度：

$$\Delta\omega_{21} = \frac{(\Delta E_2 + \Delta E_1)}{\hbar}. \tag{2.5.3}$$

正在辐射中的原子，由于碰撞，辐射过程可以中断，波列变短，谱线将变宽. 气体压强越高，碰撞越频繁，谱线就越宽. 在压强不太高时，线宽正比于压强，因此又称为压强增宽.

用脉冲激光照射原子，使原子激发并产生辐射，谱线宽度等于作用时间的倒数，激光脉冲持续时间可以短到 ns、ps 甚至 fs，这对谱线的宽度影响很大.

以上三种谱线增宽，都是均匀增宽，即每一个原子都对谱线的整体有所贡献. 多普勒增宽是一种非均匀增宽，谱线的不同部分是由不同的原子贡献的. 若光的波矢为 $\boldsymbol{k}$，原子沿 $\boldsymbol{k}$ 方向的速率为 v，原子速率分布服从麦克斯韦分布，则速率为 v 的原子的几率为：

$$W(v) = \sqrt{\frac{M}{2\pi kT}\exp\left(-\frac{Mv^2}{2kT}\right)}, \tag{2.5.4}$$

其中 M 为原子量. 如果原子谱线的频率为 ω_0，由于多普勒效应，谱线的频率变大：

$$\omega = \omega_0(1 + v/c), \tag{2.5.5}$$

因此不同速率的原子引起多普勒谱线增宽是不同的，这就是谱线的非均匀增宽. 多普勒线宽为

$$\Delta\omega_{\mathrm{D}} = \frac{2\omega_0}{c}\sqrt{\frac{2kT}{M}\sqrt{\ln 2}} = 7.16 \times 10^{-7}\omega_0\sqrt{\frac{T}{M}}. \tag{2.5.6}$$

同一种原子，温度越高，多普勒增宽越宽；在同一温度下，原子量越大的原子多普勒线宽越窄.

谱线的强度①

谱线强度与跃迁初态和末态的简并度及跃迁几率等有关.对于上能级分裂,下能级不分裂的情况,以$^2P\to{}^2S$跃迁为例(见图2.5.2),设不考虑精细结构时自发跃迁的几率为A,电子在^2P能级的寿命为$1/A$,考虑自旋轨道相互作用使^2P能级分裂成$^2P_{\frac{3}{2}}$和$^2P_{\frac{1}{2}}$,这种精细结构的能级差很小,近似地认为跃迁几率不变.

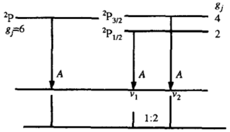


图 2.5.2 $^2P\to{}^2S$ 谱线强度比

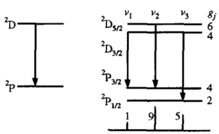


图 2.5.3 $^2D\to{}^2P$ 谱线强度比

每个子能级的简并度为$g_j=2j+1$,即$^2P_{\frac{3}{2}}$包含4个独立状态,而$^2P_{\frac{1}{2}}$包含两个独立状态.在通常的发射光谱中,原子靠碰撞激发,^2P能级中6个独立状态,每个状态上都有相同的粒子数,因此$^2P_{\frac{3}{2}}$和$^2P_{\frac{1}{2}}$能级上的粒子数N之比就等于能级简并度g_j之比.发射光强度正比于$h\nu NA$,而ν_1和ν_2非常相近,所以两条谱线的强度之比就等于$^2P_{\frac{3}{2}}$和$^2P_{\frac{1}{2}}$能级的简并度g_j之比.

对于上下能级都分裂的情况,以$^2D\to{}^2P$跃迁为例,上能级$^2D_{\frac{5}{2}}\to{}^2P_{\frac{3}{2}}$的跃迁几率和$^2D_{\frac{3}{2}}$分别向$^2P_{\frac{3}{2}}$、$^2P_{\frac{1}{2}}$的跃迁几率相同,谱线$\nu_2$的强度$I_2$与$\nu_1$、$\nu_3$的强度和$I_1+I_3$之比等于$^2D_{\frac{5}{2}}$和$^2D_{\frac{3}{2}}$这两个能级的简并度之比6/4.一般来说,离开某一$j$能级的各谱线强度之和正比于该能级的简并度$g_j$;与此对称:到达某一$j$能级的各谱线强度之和也正比于该能级的简并度$g_j$.这两条通常称为精细结构中的强度和定则.因此$(I_1+I_2)/I_3=4/2$.由此可得三条谱线的强度比为$I_1:I_2:I_3=1:9:5$,见图2.5.3.

---

① 郑乐民,原子物理,北京大学出版社,2000,78页.

2.5.2 碱金属原子光谱

极化和贯穿

碱金属原子的内层电子形成稳固的结构，与原子核构成有效电荷数为 +1 的原子实，最外层的一个电子绕原子实的运动形成的能级与氢原子的能级有一定的类似结构．然而，电子对原子实存在极化和贯穿作用．价电子的电场引起原子实中正负电荷极化形成电偶极子，价电子受电偶极子电场的吸引，能量降低；相同主量子数中，角量子数较小的轨道是偏心率较大的椭圆轨道，电子离原子实较近时，极化很强，对能量影响较大；角量子数较大的轨道接近圆形轨道，极化较弱，对能量影响较小．对于偏心率较大的轨道，价电子接近原子实的轨道很可能穿入原子实，原子实的有效电荷数就会增加，从而使有效主量子数 n 变小．能级和光谱项的表示式中出现量子数亏损(quantum defect)项 $\Delta(n,l)$．它是一个反映电子对原子实极化和贯穿作用引起的主量子数的修正数．量子数亏损不仅与 n,l 都有关，而且随元素而异，具体数值由实验测定．钠原子的量子数亏损随主量子数变化不大，它明显地依赖角量子数，角量子数越小，贯穿和极化越显著，相应的量子数亏损越大，能级表示为

$$E_{nl} = -\frac{Rhc}{(n-\Delta_l)^2}, \qquad (2.5.7)$$

相应的的光谱项为

$$T_{nl} = \frac{R}{(n-\Delta_l)^2}. \qquad (2.5.8)$$

相应的碱金属原子光谱的波数公式以钠原子为例表示为光谱项差：

主线系(principle series)：

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(3-\Delta_s)^2} - \frac{R}{(n-\Delta_p)^2}, n=3,4,5.\cdots; \qquad (2.5.9)$$

第一辅线系(diffuse series)(漫线系)：

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(3-\Delta_p)^2} - \frac{R}{(n-\Delta_d)^2}, \quad n=3,4,5,\cdots; \qquad (2.5.10)$$

第二辅线系(sharp series)(锐线系)：

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(3-\Delta_p)^2} - \frac{R}{(n-\Delta_s)^2}, \quad n=4,5,6,\cdots; \qquad (2.5.11)$$

基线系(fundamental series)(柏格曼系)：

$$\tilde{\nu}=\frac{R}{(3-\Delta_d)^2}-\frac{R}{(n-\Delta_f)^2}, \quad n=4,5,6,\cdots. \qquad (2.5.12)$$

原子光谱由外壳层的电子组态决定,同一元素的中性原子、离子的光谱完全不相同. 图2.5.4为中性锂原子的能级跃迁图.

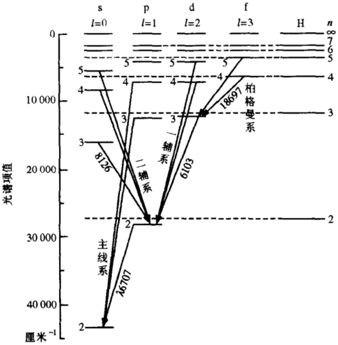


图 2.5.4　中性锂原子的能级跃迁图

由基态到第一激发态的跃迁产生的谱线称为共振线或第一共振线. 各线系的第一项通常称为线系限,表示 $n\to\infty$ 时谱线的波数.

例题 2.5.1　钠原子的基态为 3S,已知其共振线波长为 5893 Å,漫线系第一条谱线的波长为 8193 Å,基线系第一条谱线的波长为 18459 Å,主线系的线系限波长为 2413 Å,求 3S、3P、3D、4F 各谱项的项值.

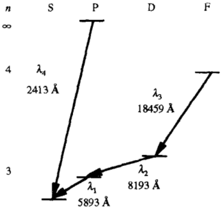
解:按题意画出能级跃迁图.

$$\frac{1}{\lambda_4}=T_{3S}-T_{\infty P}=T_{3S}, \quad T_{3S}=\frac{1}{\lambda_4}=4.144\times10^6\ \mathrm{m}^{-1};$$

$$\frac{1}{\lambda_1}=T_{3S}-T_{3P}, \qquad T_{3P}=T_{3S}-\frac{1}{\lambda_1}=2.447\times10^6\ \mathrm{m}^{-1};$$

$$\frac{1}{\lambda_2} = T_{3P} - T_{\infty D}, \qquad T_{3D} = T_{3P} - \frac{1}{\lambda_2} = 1.266 \times 10^6\,\mathrm{m}^{-1};$$

$$\frac{1}{\lambda_3} = T_{3D} - T_{4F}, \qquad T_{4F} = T_{3D} - \frac{1}{\lambda_3} = 6.843 \times 10^5\,\mathrm{m}^{-1}.$$



碱金属原子光谱的精细结构

用原子态间跃迁表示碱金属原子光谱系：

主线系 $\quad {}^2P_{\frac{1}{2}} \to {}^2S_{\frac{1}{2}},\ {}^2P_{\frac{3}{2}} \to {}^2S_{\frac{1}{2}} \qquad \Delta l = -1,\ \Delta j = 0,\ -1 \qquad$ (2.5.13)

第一辅线系（漫线系） $\quad {}^2D_{\frac{3}{2}} \to {}^2P_{\frac{1}{2}},\ {}^2D_{\frac{3}{2}} \to {}^2P_{\frac{3}{2}},\ {}^2D_{\frac{5}{2}} \to {}^2P_{\frac{3}{2}} \qquad \Delta l = -1,\ \Delta j = 0,\ -1 \qquad$ (2.5.14)

第二辅线系（锐线系） $\quad {}^2S_{\frac{1}{2}} \to {}^2P_{\frac{1}{2}},\ {}^2S_{\frac{1}{2}} \to {}^2P_{\frac{3}{2}} \qquad \Delta l = +1,\ \Delta j = 0,\ +1 \qquad$ (2.5.15)

柏格曼线系（基线系） $\quad {}^2F_{\frac{5}{2}} \to {}^2D_{\frac{3}{2}},\ {}^2F_{\frac{5}{2}} \to {}^2D_{\frac{5}{2}},\ {}^2F_{\frac{7}{2}} \to {}^2D_{\frac{5}{2}} \qquad \Delta l = -1,\ \Delta j = 0,\ -1 \qquad$ (2.5.16)

根据跃迁选择定则，很容易解释碱金属光谱的精细结构. 由(2.3.13)知 LS 耦合的相互作用能为：

$$\Delta E_{ls} = \frac{Rhc\alpha^2 Z^4}{n^3}\,\frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2l(l+1/2)(l+1)}. \qquad (2.5.17)$$

碱金属每一对双层能级的 n 和 l 是相同的，$s=1/2$ 是不变的，只有

$j=l+1/2, l-1/2$不同．一对双层能级的能级间隔为：

$$\Delta E_{j\pm1/2}=\frac{Rhc\alpha^2Z^4}{n^3l(l+1)}. \qquad (2.5.18)$$

用波数差表示为：

$$\Delta\tilde{\nu}=\frac{R\alpha^2Z^4}{n^3l(l+1)}. \qquad (2.5.19)$$

图 2.5.5 为中性钠原子的原子态跃迁图．钠黄光 D 线 5890 Å 和 5896 Å 就是由于 3P 能级分裂成两个能级 $^2P_{1/2}$ 和 $^2P_{3/2}$，跃迁到 3S 能级的精细结构．

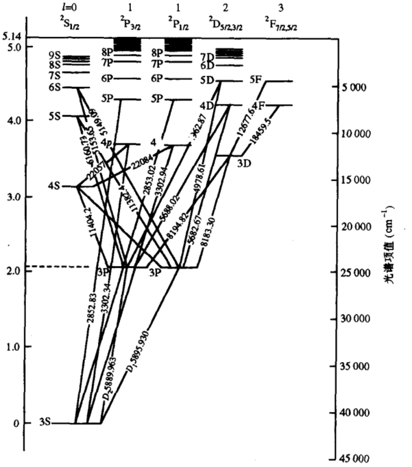


图 2.5.5　中性钠原子的原子态跃迁图

碱金属主线系和第二辅线系的每一条光谱线由两条线构成，主线系中这两条光谱线间隔随波数的增加而逐渐缩小，最后两条线并

入一条线系限；第二辅线系这两条线的间隔相同，直到线系限也是这样；第一辅线系的每一条光谱线由三条线构成，最外两条线的间隔同第二辅线系两条线间隔相等，这是因为碱金属原子的 s 能级是单层的，其余所有 p，d，f 等能级都是双层的．对相同的角量子数 l，双层能级的间隔随主量子数 n 的增加而渐减．

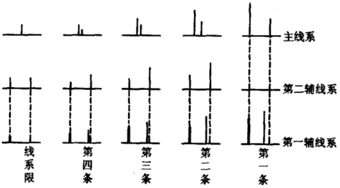


图 2.5.6　碱金属原子光谱的精细结构

2.5.3　氢原子光谱

波数公式

氢原子中不存在多电子原子中电子对原子实的极化和贯穿作用，氢原子光谱的实验结果可以用巴耳末-里德伯公式表示

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) = T(m) - T(n),$$

$$m = 1,2,3\cdots,\quad n = m+1, m+2, m+3, \cdots. \tag{2.5.20}$$

不同的 m 对应的线系如下：

$m=$	1	2	3	4	5	6
	Lyman	Balmer	Paschen	Brackett	Pfun	Humphreys

R_{H} 为氢的里德伯常数，实验值等于 $1.096\,775\,8\times10^5\ \mathrm{cm}^{-1}$．这与 R_∞ 有所区别，如果考虑电子的折合质量，R_{H} 的理论值为：

$$R_{\mathrm{H}} = \frac{2\pi^2\mu e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 h^3 c} = 1.096\,775\,8\times10^5\ \mathrm{cm}^{-1}, \tag{2.5.21}$$

与实验值完全一致，这表明了氢原子量子理论的成功．

例题 2.5.2　分别计算氢原子的莱曼系、巴耳末系和帕邢系中

最短和最长的波长，这三个线系分别属于哪个电磁波段？

解　莱曼系：$\frac{1}{\lambda}=R_H\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{n^2}\right)$，$R_H=1.0967758\ m^{-1}$

最短波长，相应于最大能量，$n\to\infty$，911.6 Å，紫外；

最长波长，相应于最小能量，$n=2$，1215 Å，紫外.

巴耳末系：$\frac{1}{\lambda}=R_H\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right)$，最短波长：$n\to\infty$，3646 Å，紫外；

最长波长：$n=3$，6563 Å，可见光.

帕邢系：$\frac{1}{\lambda}=R_H(\frac{1}{3^2}-\frac{1}{n^2})$，最短波长：$n\to\infty$，8204 Å；最长波长：$n=4$，18752 Å，红外.

能级跃迁

用原子间跃迁表示氢原子光谱，如图 2.5.7：

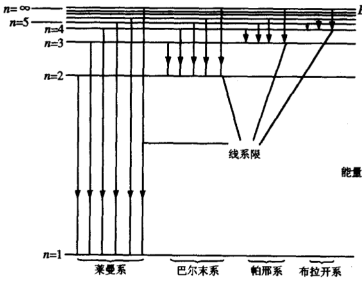


图 2.5.7　氢原子能级图，光谱的巴耳末系和系限外的连续谱

氢原子光谱的精细结构

在碱金属中，由于轨道贯穿和原子实极化，同一 n 而不同 l 的能级已差别很大，相对论效应也对不同 l 引起差别，但比较起来很小，因此没有提出. 对氢原子相对论效应和自旋-轨道相互作用的影响有相同的数量级，必须考虑. 同时考虑相对论效应和自旋-轨道耦合，氢原子的能级的精细结构项为

$$\Delta E_{FS} = -R_H hc\frac{\alpha^2}{n^3}\left(\frac{1}{j+1/2}-\frac{3}{4n}\right)$$
$$=\frac{\alpha^2}{n}E_n\left(\frac{1}{j+1/2}-\frac{3}{4n}\right). \quad (2.5.22)$$

忽略精细结构项时的能级 E_n，只与主量子数 n 有关，对不同的 l 和 j 是简并的. 考虑精细结构项时的能级 E_n 只与 n、j 有关，具有相同 n、j 值和不同 l 值的能级无精细结构分裂. 如 $2^2S_{1/2}$和 $2^2P_{1/2}$的能级是简并的. 除 $l=0$ 的 S 态是单能级外，对于所有其他的 l 值，相应的能级由于 j 取双值 $l+\frac{1}{2}$和 $l-\frac{1}{2}$而分裂成两个能级，形成氢原子光谱的双层结构.

用原子态间跃迁表示莱曼系为：

$$n^2P_{\frac{1}{2}},\ n^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 1^2S_{\frac{1}{2}} \qquad \Delta l=-1,\ \Delta j=0,\ -1 \qquad (2.5.23)$$

巴耳末系为：

$$n^2P_{\frac{1}{2}},\ n^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow 2^2S_{\frac{1}{2}} \qquad \Delta l=-1,\ \Delta j=0,\ -1 \qquad (2.5.24)$$

$$n^2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2^2P_{\frac{1}{2}},\ 2^2P_{\frac{3}{2}} \qquad \Delta l=+1,\ \Delta j=0,\ +1 \qquad (2.5.25)$$

$$n^2D_{\frac{3}{2}} \rightarrow 2^2P_{\frac{1}{2}},\ 2^2P_{\frac{3}{2}};\quad n^2D_{\frac{5}{2}} \rightarrow 2^2P_{\frac{3}{2}} \qquad \Delta l=-1,\ \Delta j=0,\ -1 \qquad (2.5.26)$$

类氢离子光谱

He^+、Li^{++}和 Be^{+++}都是原子核外只有一个电子的原子体系. 类氢离子的光谱结构和氢原子光谱非常相似，差别在于里得伯常数和原子核的正电荷数.

2.5.4 兰姆移位

兰姆-雷瑟福实验

由氢原子能级精细结构项修正公式可知，氢原子的 $2^2S_{1/2}$和

$2^2P_{1/2}$的能级重合. 1947 年兰姆(W. E. Lamb)和他的学生雷瑟福(R. C. Retherford)观测到氢原子的 $2^2S_{1/2}$和 $2^2P_{1/2}$的能级并不重合,而有一个大小为 1057.8 MHz 的裂距,这就是著名的兰姆移位①.

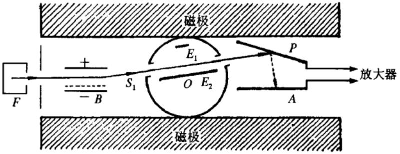


图 2.5.8 兰姆-雷瑟福实验装置

图 2.5.8 为兰姆-雷瑟福实验装置,当炉子 F 的温度为 2500 K 时,进入炉中 64%的氢气分子解离成氢原子. 出射氢原子的平均速度达 8×10^3 m/s. 氢原子束通过能量大于 10.2 eV 的电子轰击器 B 时,部分氢原子从基态被激发到 $2^2S_{1/2}$、$2^2P_{1/2}$和 $2^2P_{3/2}$态. 由于 $2^2S_{1/2}$态不能自发跃迁到基态,因为这是选择定则所不允许的. 因此是亚稳态. 处于 $2^2P_{1/2}$和 $2^2P_{3/2}$态的氢原子,它将很快通过自发跃迁回到基态,到达不了探测器 PA. 处于 $2^2S_{1/2}$态的氢原子通过 S_1 经过同轴管和射频调谐共振腔,到达探测器 P 板,将激发能量给了钨的电子. 由于钨的脱出功小于 10.2 eV,因此可以打出电子,从而使 PA 板间接收到电流讯号. 射频调谐共振腔中平板 E_2 可以送出平面射频电磁波,频率为 $\nu=\Delta E/h$,当 ΔE 为 2S 和 2P 之间的能级差时,氢原子从 $2^2S_{1/2}$态被激发到 $2^2P_{3/2}$态. 原子很快自发跃迁回基态. 到达探测器 P 板上的原子数减少,调整电磁波频率达到 PA 间电流突然下降时,表示电磁波频率满足 $2^2S_{1/2}$和 $2^2P_{3/2}$之间的能级差. 谐振频率是利用磁场中的塞曼效应进行微调的.

由于 $2^2P_{1/2}$和 $2^2P_{3/2}$相差 0.365 cm^{-1},或 10950 MHz,如果 $2^2S_{1/2}$和 $2^2P_{1/2}$重合,那么,当谐振腔内的射频频率调到 10950 MHz 时,发

① W. E. Lamb and R. C. Retherford, *Phys. Rev.*, **72**(1947)241;倪光炯、王海滨、严军、李海龙,高能物理与核物理,**24**(2000)400.

生共振吸收，$2^2S_{1/2}$态都跃迁到$2^2P_{3/2}$态，在到达探测器P之前就自发跃迁到基态，PA间电流值应该出现低谷. 兰姆和雷瑟福观测到发生这个吸收跃迁的谐振腔内的射频频率不是 10950 MHz，而是比此数少了 1000 MHz，说明$2^2S_{1/2}$态在$2^2P_{1/2}$态之上. 后来用电磁波使氢原子从$2^2S_{1/2}$态受激跃迁到$2^2P_{1/2}$态，测得所需频率也是 1000 MHz，更精确测量的结果是 1057. 77±0. 10 MHz. $2^2S_{1/2}$能级的这一移位称为兰姆移位. 兰姆和雷瑟福又测得$3^2S_{1/2}$态要比原来的理论值高出 0. 010 cm^{-1}. 既然肯定了$2^2S_{1/2}$态在$2^2P_{1/2}$态之上，$2^2S_{1/2}$态不自发跃迁到$2^2P_{1/2}$态上，却仍然有亚稳态的性质，这是因为自发跃迁的几率与所辐射频率的立方成正比，这两个能级差很小，因此自发跃迁的几率很小.

兰姆移位的意义

兰姆移位的实验事实同量子力学的理论显然有出入，这是由于原来只考虑电子受原子核的静电场的作用. 人们不得不考虑电子和它自己发出的辐射之间存在着相互作用. 原子核和电子之间的库仑场的作用也是通过虚光子实现的，这样使场对电子的作用比直接作用稍减弱. 这些作用都影响电子态的能量，S 态受影响最大，所以能级显现出微小的移动. 兰姆移位这一实验事实是对量子电动力学理论的有力验证，推动了量子电动力学理论的发展. 由于工作的重要性和创新性，兰姆获得了 1955 年诺贝尔物理学奖.

2. 5. 5 原子光谱的超精细结构

钠 D 线的超精细结构

钠 D 线是由 3P 能级向 3S 跃迁产生的，其精细结构是由$3^2P_{1/2}$和$3^2P_{3/2}$能级向$3^2S_{1/2}$跃迁产生的双线D_1和D_2. 其超精细结构是由于$3^2S_{1/2}$能级的超精细分裂引起的. 当然，$3^2P_{1/2}$和$3^2P_{3/2}$能级也要发生超精细分裂. 但是它们离开原子核较远，原子核自旋角动量和这两个能级的总角动量相互作用很弱，因此其超精细分裂的裂距比$3^2S_{1/2}$能级分裂的裂距要小得多. 这里只讨论$3^2S_{1/2}$能级的超精细分裂. 已知钠的核自旋量子数为 3/2，$3^2S_{1/2}$原子态的$j=1/2$，所以原子体系

的总角动量 F 有两个值：2 和 1. 正是由于 $3^2S_{1/2}$能级分裂为两个能级，使 D_1 和 D_2 都成了双线. 在超精细结构的子能级之间能发生直接的跃迁. 例如钠的基态 $3^2S_{1/2}$的超精细分裂的两个能级 $F=1$ 和 $F=2$ 之间的跃迁，频率为 1772 Hz.

原子频率标准[①]

在超精细结构子能级之间发生的跃迁具有特殊的意义. 由于原子谱线频率的稳定性和精确性，^{133}Cs 基态 $6^2S_{1/2}$超精细分裂的两个子能级 $F=4$ 和 $F=3$ 之间的跃迁频率，1960 年被规定为国际频率标准. 其频率为 9 192 631 770 Hz. 频率的倒数为时间，所以"1 秒"的定义为：^{133}Cs 基态 $6^2S_{1/2}$超精细分裂的两个子能级 $F=4$ 和 $F=3$ 之间的跃迁所对应的电磁波振动 9 192 631 770 个周期的时间.

由于频率和时间的精确定义，1983 年国际会议通过长度米的定义："一米是光在真空中在 1/299 792 458 秒的时间间隔内所经路径的长度."

2.5.6 多电子原子光谱

两个价电子原子

碱土族元素铍、镁、钙、锶、钡、镭、锌、镉、汞等是外层只有两个价电子的原子，其能级与光谱和氦原子有相仿的结构：两个价电子的原子有两套线系，即有两个主线系，两个锐线系，两个漫线系，…，其结构有显著不同，一套均为单线，另一套有复杂的结构. 因为两价原子有两套能级，一套能级都是单重态，另一套能级都是三重态. 这两套能级之间一般没有相互的电偶极跃迁.

图 2.5.9 表明了氦原子的能级和光谱线相应的跃迁. 氦原子的能级有如下特点：(1) 两套能级：一套是单重的，另一套是三重的. 它们各自内部的跃迁产生了两套相互独立的光谱. 早期曾以为有两种氦原子，具有复杂光谱结构的称为正氦(ortho-helium)，另一种称为仲氦(para-helium). 著名的黄色 D3 线 5876 Å 是三重态漫线系的第一条线，这两套能级之间没有相互跃迁，图中有一条 5916 Å 的跃

① 王义遒、王庆吉、付济时，量子频标原理，科学出版社，1986.

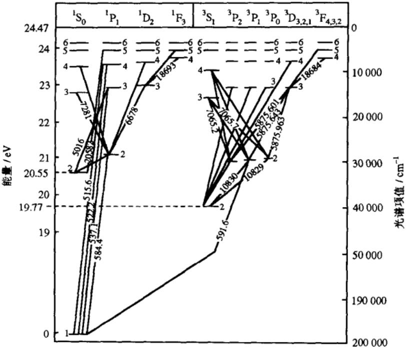


图 2.5.9 氦原子能级

迁起初以为是三重态 2^3P_1 与单重态 1^1S_0 之间的跃迁，后来已被确认为是杂质氖的谱线.（2）氦原子的基态与第一激发态之间的能量相差 19.77 eV，氦原子的电离能 24.58 eV 是所有元素中最大的.（3）三重态的能级总是低于相应的单重态的能级，例如 2^3S_1 态的能量比 2^1S_0 的低 0.8 eV.（4）第一激发态 2^3S_1 和 2^1S_0 都是亚稳态.实验测得 2^1S_0 的寿命为 19.5 ms.

作为二价原子能级结构的一个例子，图 2.5.10 给出了汞原子的简化能级跃迁图.原子态基本上属于 *LS* 耦合，因此用 *LS* 耦合的谱项符号表示，但是有明显的偏离.其基态的电子组态是 $6s^2$，谱项为 $^1S_0$.激发态的电子组态为 $6snl$.最低的一组激发态是 6s6p，谱项为 $^1P_1$、$^3P_{2,1,0}$，图中画出了由 $6s6p\ ^3P_1$ 到 $6s^2\ ^1S_0$ 的跃迁，显然违反 $\Delta S=0$ 的电偶极跃迁选择定则.有趣的是，这个违禁跃迁正是汞原子发射光谱线中很强的一条紫外线，波长为 2537 Å.这种违禁跃迁完全是因为自旋-轨道相互作用偏离 *LS* 耦合.

外层具有三个电子的原子电离掉一个电子之后的一价离子、外

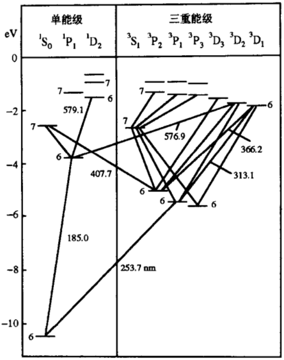


图 2.5.10 汞原子能级跃迁

层具有四个电子的原子电离掉两个电子之后的二价离子、…，如 B^+、Al^+、C^{++}、Si^{++}…，其能级和光谱结构与外层具有两个电子的原子类似，具有单重态和三重态两套能级以及相应的两套光谱系.

光谱和能级的位移律

原子序数为 Z 的中性原子的光谱和能级，同原子序数为 $Z+1$ 的原子一次电离后离子的光谱和能级，以及原子序数为 $Z+2$ 的原子二次电离后的离子的光谱和能级，…，具有类似的结构，例如 H、He^+、Li^{++}，Li、Be^+、B^{++}等，这是由于它们具有相同的电子组态.

多重性的交替律

在同一周期内各元素的原子按顺序交替地具有偶数或奇数的多重态，因为外层电子逐一增加一个，LS 耦合的总自旋量子数交替变化，从而 $2S+1$ 在偶数和奇数之间交替变化.

周期性

元素的光谱性质显示周期性的变化. 碱金属原子有相似的光谱

结构.碱土金属原子也有相似的光谱结构.元素周期表中同一竖列中诸元素原子都有相似的光谱结构.

习　题

2.5.1　用 12.9 eV 的电子去激发基态氢原子,求受激发的氢原子向低能级跃迁时发出的光谱线的波长.不考虑能级的精细结构和超精细结构.

2.5.2　已知铍($Z=4$)的离子 Be^+的主线系共振线及其线系限的波长分别为 3210 Å 和 683 Å,计算该离子 S 项和 P 项的量子数亏损及锐线系第一条谱线的波长.

2.5.3　根据公式 (2.5.22),以 $10\alpha^2E_n$ 为能量单位画出氢原子主量子数 $n=1$、2、3 的精细结构能级图及可能的跃迁.

2.5.4　钾原子主线系第一条谱线波长为 7665 Å,线系限波长为 2858 Å,求相应的 s、p 谱线的量子数亏损.

2.6　内层电子激发和 X 射线谱

2.6.1　X 射线的发现

英国物理学家克鲁克斯 (W. Crookes) 设计制作了高真空的阴极射线管,常称为克鲁克斯管. 1879 年他曾证明阴极射线是带电粒子,为汤姆孙发现电子奠定了基础.他抱怨在他的阴极射线管附近的照相底片莫明其妙地被曝光了. 1890 年古德斯比德(A. W. Goodspeed) 和詹宁斯(W. W. Jennings)也发现了阴极射线管附近照相底片曝光的同样问题.

1895 年 11 月 8 日晚德国维尔茨堡大学校长、物理学家伦琴(Wilhelm Konrad Röntgen)在阴极射线实验中,为了防止外界对放电管的影响,在完全遮光的暗室里做实验.为了不使克鲁克斯管内的可见光线漏出管外,他用黑纸板把放电管完全包了起来,实验时,意外地发现在 1 米以外的涂有铂氰化钡的荧光屏发出微弱的荧光.他十分惊奇,将荧光屏反转,背面的铂氰化钡仍然发出荧光,将荧光屏移到 2 米以外,仍然有荧光.当时已知阴极射线在空气中只能穿行几

厘米，他确信这种现象无法用阴极射线的性质解释，这是一种新的射线. 他废寝忘食地连续工作了六个星期，发现这种射线具有很强的穿透性，实验中他又意外地发现自己手的骨骼的图象. 12 月 22 日伦琴夫人到实验室来，他为她拍摄了带有戒指的左手骨骼照片，这张骨骼照片在医学上具有划时代的意义. 1895 年 12 月 28 日他向维尔茨堡物理学医学学会递交了他的论文《论新的射线》①. 1901 年伦琴成为第一个当之无愧的诺贝尔物理学奖获得者.

伦琴发现 X 射线后，观测不到这种射线像可见光那样地折射、反射和衍射，误认为 X 射线与光无关. 直到 1912 年，德国物理学家冯・劳厄(Max von Laue)提出 X 射线是波长很短的电磁波，电磁波经过狭缝将产生衍射现象，狭缝的大小必须和电磁波的波长同数量级或更小. X 射线的波长可以从能量推算约为 10^{-10} m 的量级，人工加工这种大小的狭缝是不可能的，冯・劳厄首先建议用晶体这个天然的光栅研究 X 射线的衍射. 这个设想很快在 1913 年被弗里德里克 (W. Friedrich)、尼平 (P. Knipping)和劳厄②从实验证实. 从而有力地证明了 X 射线的波动性. 冯・劳厄因研究 X 射线在晶体中的衍射获 1914 年诺贝尔物理学奖.

2.6.2 X 射线发射谱

在克鲁克斯射线管两极加上一定的电压，管的阳极就会发出 X 射线. 当电压不超过一定限度时，只产生连续光谱，这种辐射称为韧致辐射. 高速电子在靶原子核的库仑场中骤然减速时产生 X 射线的机制称为韧致辐射，这时高速电子的动能转化为辐射能. 韧致辐射光谱是连续谱，不反映靶材料原子的性质. 当管压超过一临界值后，所生辐射光谱，在连续谱上还叠加有线状光谱，发生线状光谱的辐射，称为标识辐射或特征辐射. 特征 X 射线谱是英国物理学家巴克拉(C. G. Barkla)在 1906 年首先发现的，因此他获得 1917 年诺贝尔物理学奖.

---

① W. K. Röntgen, *Science*, **3**(1896)227; 726.

② W. Friedrich, P. Knipping and M. Laue, *Ann. Physik*, **41**(1913)971.

连续谱波长连续变化，存在一最短波长 λ_{min}，它与阳极靶的材料无关，仅取决于所加电压. X 射线的最短波长 λ_{min}对应于电子动能全部转化为 X 射线光子的能量：

$$h\frac{c}{\lambda_{min}} = eU, \tag{2.6.1}$$

根据加速电压 U 和 X 射线最短波长 λ_{min}的测定可得普朗克常数，这是早期测定普朗克常数的一种方法. X 射线波长范围一般在 0.01 Å 到 10 Å，或者更长一些. 比 1 Å 短的 X 射线，通常称为硬 X 射线；比 1 Å 长的称为软 X 射线.

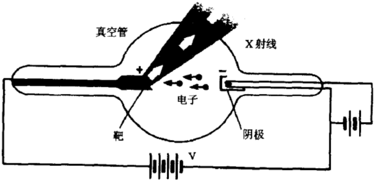


图 2.6.1　X 射线管

例题 2.6.1　40.0 keV 电子产生的 X 射线的最短波长为 31.1 pm，试求普朗克常数.

解　$\lambda_{min} = \frac{hc}{eU}, eU = 40.0\ \mathrm{keV},$

$$1\ \mathrm{eV} = 1.60 \times 10^{-19}\ \mathrm{J}, \quad \lambda_{min} = 31.1\ \mathrm{pm},$$

$$h = \frac{\lambda_{min} eU}{c} = 6.62 \times 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s}.$$

当入射电子的能量超过一定限度时，在 X 射线连续谱上叠加一些分立的谱线，分立谱线的波长与所加电压无关，取决于阳极靶的材料. 每一种元素有一套一定波长的射线谱，成为这种元素的标记，故称为标识谱.

每一种元素的标识谱通常用 $K_\alpha, K_\beta, K_\gamma, L_\alpha, L_\beta, L_\gamma$ 等标记. 一个入射电子轰击阳极靶时，打出内部 K 壳层一个电子. 这样在 K 壳层

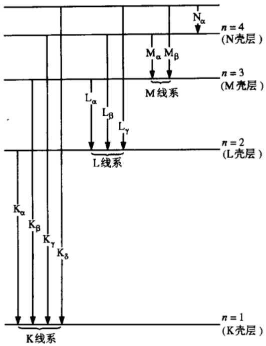


图 2.6.2　X 射线标识谱谱系

产生一个空穴，外壳层电子将跃迁来填充这个空穴. 在这个过程中原子发射一个 X 光子，如果这个打出的电子来自 K 壳层，填充电子来自 L,M,N 壳层，此 X 射线称为 $K_\alpha, K_\beta, K_\gamma$ 线. 如果这个打出电子来自 L 壳层，填充电子来自 M,N,O 壳层，此 X 射线称为 $L_\alpha, L_\beta, L_\gamma$, 线. 以此类推. 实验发现不同元素的标识谱不显示周期性变化，它与元素的化合状态基本无关. 这些说明标识谱是原子中内层电子的跃迁产生的.

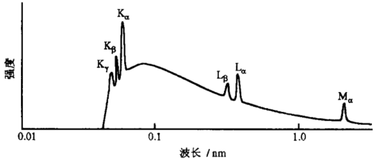


图 2.6.3　30 keV 电子撞击银靶产生的银的 X 射线标识谱，背景为韧致辐射产生的连续谱

2.6.3 莫塞莱定律和原子序数的测定

不同元素的标识谱具有相似的结构，随着原子序数 Z 增加，原子的标识谱单调变化，与原子光谱随着原子序数 Z 的增加而呈现的周期性变化大不相同. 1913 年卢瑟福实验室的年轻工作人员莫塞莱(H. G. J. Moseley)测量了从铝到金共 38 种元素的光谱后，发现元素的 K_α 线频率的平方根与原子序数成线性关系①. 并得到经验公式：

$$\nu_{K_\alpha} = 0.248 \times 10^{16}(Z - b)^2, \quad b \sim 1. \tag{2.6.2}$$

就在这一年，玻尔提出了原子结构的量子理论，莫塞莱一看到玻尔的论文，立刻发现他提出的经验公式，可以从玻尔理论导出：

$$\nu_{K_\alpha} = \frac{\Delta E}{h} = RcZ^2\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right) = \frac{3}{4}RcZ^2 \approx 0.246 \times 10^{16}Z^2. \tag{2.6.3}$$

为什么在莫塞莱公式中会出现 $(Z-1)$ 的因子呢？考虑原子中一个 L 壳层的电子，跃迁到 K 壳层中的空穴，并辐射一个 K_α 的 X 射线光子. 当 K 壳层出现一个空穴时，考虑电子屏蔽效应，L 壳层中的电子感受到的是 $(Z-1)$ 个正电荷的吸引，对于 K_α 跃迁，Z 用 $Z-b$ 代替. 因此 L 壳层电子跃迁到 K 壳层时，发出的辐射频率应为

$$\nu_{K_\alpha} = Rc\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right) = (Z - b)^2, \tag{2.6.4}$$

方程两边取平方根得

$$\sqrt{\nu_{K_\alpha}} = \left(\frac{3Rc}{4}\right)^{1/2}(Z - b), \tag{2.6.5}$$

这个方程可以写成

$$\sqrt{\nu_{K_\alpha}} = aZ - ab, \tag{2.6.6}$$

这里 a 是常数，$b\approx 1$. 这就是莫塞莱定律.

由于内壳层电子负电荷对原子核正电荷的屏蔽，外壳层跃迁电子感受到的原子核的正电荷并不是 Ze，而是要小一些. 等效电荷数

① H. G. J. Moseley, *Phi. Mag.*, **26**(1913)1024; **27**(1914)703.

为 $Z-\sigma_n$，其中 σ_n 称为激发电子的屏蔽数，它与电子所在的壳层 n 有关. 从而 K 线系的波数为

$$\tilde{\nu}_K = Rc\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{n^2}\right)(Z-\sigma_K)^2, \qquad n=2,3,\cdots \quad (2.6.7)$$

L 线系的波数为

$$\tilde{\nu}_L = Rc\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right)(Z-\sigma_L)^2, \qquad n=3,4,\cdots \quad (2.6.8)$$

经验数据为 $\sigma_K=1$，$\sigma_L=7.4$. ①

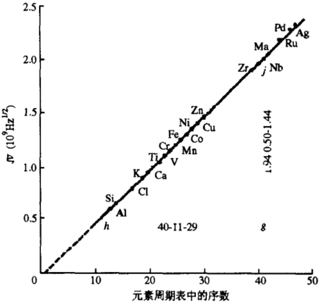


图 2.6.4 X 射线 K 线系的莫塞莱图

莫塞莱定律表明，内层电子的激发主要取决于原子核的性质，受外层价电子的影响很小. 根据元素 X 射线相应谱线在莫塞莱图上的位置，就可以定出该元素的原子序数. 莫塞莱的实验第一次提供了精确测量原子序数 Z 的方法. 历史上就是用莫塞莱的公式定出了元素的原子序数 Z，并纠正了 ^{27}Co 与 ^{28}Ni 在周期表上的次序.

例题 2.6.2 电子轰击钴靶，钴特征谱线 K_α 线波长为 178.9 pm，第二个较弱的钴靶中杂质的特征谱线 K_α 线波长为

---

① 赵凯华、罗蔚因，量子物理，高等教育出版社，2001，p267.

143.5 pm. 试确定此杂质是什么元素.

解　$\frac{\lambda_1}{\lambda_2}=\frac{\nu_2}{\nu_1}=\frac{(Z_2-1)^2}{(Z_1-1)^2}, Z_1=27, Z_2=30$，杂质为锌(Zn).

2.6.4　X 光电子谱

用一特征 X 射线，例如 Cu 的 K_α 线照射样品，把电子从被照射的原子、分子或固体中击出，这个被击出的 X 光电子的动能等于入射 X 光量子能量与电子在原子中的结合能之差. 用电子能谱仪，测出这个电子的动能，也就测出了电子在原子中的结合能，近代的电子能谱仪能量分辨率可达 10^{-5}. 如果入射到能谱仪的电子动能为 1 keV，能谱仪能测出 10 meV 的差异. 由于内层电子能级反映了原子的性质，X 光电子谱可以用来分析样品的化学成分、化学键和外层电子电离对内层电子的影响.

2.6.5　内光电效应　俄歇谱

内层电子被电离以后，除了发射 X 射线以外，还可通过其他非辐射过程回到基态. 另一种途径称为俄歇电子发射，是法国科学家俄歇(P. Auger)在 1923 年发现的.

假如在 K 壳层中有一个空穴，即 K 壳层中有一个电子被电离了，K 壳层中缺少一个电子. 一个 L 电子从 L 壳层进入 K 壳层，并且填充这个空穴. 由这个过程释放的能量可以发射 X 射线，也可以传递给另一个壳层的电子，例如一个 M 壳层的电子，使它电离，这个从 M 壳层电离出来的电子称为俄歇电子. 设 K、L、M 壳层电子的结合能分别为 E_K、E_L 和 E_M，当电子从 L 壳层跃迁到 K 壳层时，释放的能量为 E_K-E_L，如果这部分能量被 M 壳层的一个电子获得，电离后成为俄歇电子，这个俄歇电子的动能为：

$$E_d^A=E_K-E_L-E_M. \tag{2.6.9}$$

定义 K 壳层的荧光产额为：

$$\omega_K \equiv \text{产生 X 射线的光子数 / K 壳层空穴数}, \tag{2.6.10}$$

表示原子中 K 壳层有了空穴后，产生 X 射线的几率，$1-\omega_K$ 就是产生俄歇电子的几率. 同样可以定义 ω_L 等. 一般来说，轻元素发射俄歇

电子的几率较大，重元素发射 X 射线的几率较大.

俄歇电子谱(AES)仪[①]的主要构成包括一个射线束（X 射线或电子源），一个检测和分析俄歇电子的能量分析器，一个对样品表面进行溅射的离子枪和一个超高真空系统. 筒镜式能量分析器(CMA)是电子诱发 AES 最常用的分析器，它的接收圆锥大，收集效率高，也具有很好的透射特性. 调节适当的能量分辨率还可以减少表面电子束的破坏. CMA 最大的优点是可以同轴安装离子溅射枪，可以进行深度剖面分析. X 射线和入射电子束所消耗材料表面物质的量很少，因此该技术是非破坏性的. 包括离子枪在内的仪器为研究固体组成随深度的变化提供了强有力的工具. 交替进行溅射和俄歇分析可以得到样品组成的深度剖面，深度分辨率由溅射速率控制. 溅射面积应远大于分析面积，以避免溅射坑边缘引起的复杂变化. 在进行 AES 分析以前应对要分析的表面进行仔细的光学测图，避开样品表面不规则的部分，过于粗糙的表面会降低定量分析的精度.

用 AES 研究材料表面有其独到之处：(1) 可以分析原子序数≥3 的元素；(2) 其很高的侧向分辨率（$<0.1\ \mu m$）可用于研究表面微区组成，如显示和比较单个样品表面不同晶畴和形貌特征、鉴定亚 μm 级物相的存在；(3) 结合离子溅射技术研究组成深度剖面可以得到样品近表面组成随深度的变化.

2.6.6 X 射线的吸收

一束单一波长、强度为 I_0 的 X 射线穿过厚度为 x 的吸收物后，强度减弱为

$$I = I_0 e^{-\mu x}, \qquad (2.6.11)$$

μ 称为衰减常数. X 射线经过物体后减弱是因为吸收和散射两种过程产生的，因此 μ 为真实吸收系数 τ 和散射系数 σ 之和

$$\mu = \tau + \sigma. \qquad (2.6.12)$$

把上述三个系数用单位厚度和单位截面中的原子数除，就得到原子衰减常数、原子吸收系数和原子散射系数：

① 李一良、魏春生、郑永飞，地学前缘，中国地质大学，北京，5 (1998) 311.

$$\mu_a = \frac{\mu}{\frac{\rho N}{A}},\quad \tau_a = \frac{\tau}{\frac{\rho N}{A}},\quad \sigma_a = \frac{\sigma}{\frac{\rho N}{A}}, \tag{2.6.13}$$

这里 ρ 为吸收物的质量密度，A 是原子量，N 是阿伏伽德罗常数. 吸收系数与波长 λ 及吸收物原子序数 Z 的关系为

$$\tau_a = CZ^4\lambda^3. \tag{2.6.14}$$

X 射线具有很高的穿透本领，一束 X 射线穿过一个物体，照射到荧光板或照相底版上，由于 X 射线被物体各部分吸收的程度不同，在荧光板或照相底版上就会产生明暗的差别，这样就显出物体内部的影像. 这种 X 射线透视成像的方法广泛应用于医疗和工业材料及产品的检验.

2.6.7 康普顿效应

X 射线被散射后，除波长不变的部分外，还有波长变长的部分出现，增长的波长随散射角而变，这种现象首先由康普顿(A. H. Compton)在 1922 年观测到并提出理论解释，常称为康普顿效应[①]. 康普顿认为这种现象是 X 射线光子同电子碰撞的结果. 由于 X 射线光子的能量(约为几十 keV)比原子中外层电子的束缚能(约为几十 eV)大很多，可近似地将束缚电子看成是自由电子.

波长为 λ 的 X 射线光子与散射物原子中质量为 m_0、自由而相对静止的电子碰撞，然后在与入射方向成 θ 角的方向观测到波长为 λ' 的散射的 X 射线. 电子在碰撞中受到反冲，以能量 mc^2 在与入射 X 射线方向成 φ 角度的方向上射出. 按体系的动量和能量守恒有

$$h\frac{c}{\lambda} + m_0c^2 = h\frac{c}{\lambda'} + mc^2, \tag{2.6.15}$$

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}' + m\boldsymbol{v}, \tag{2.6.16}$$

其中 $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}', m\boldsymbol{v}$ 分别表示光子碰撞前后和电子碰撞后的动量. 由动量守恒和德布罗意关系得

$$(mv)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2\left(\frac{h}{\lambda}\right)\left(\frac{h}{\lambda}\right)\cos\theta, \tag{2.6.17}$$

---

① A. H. Compton, *Phys. Rev.*, **22**(1923)409.

$$(mv)^2c^2 = \left(\frac{hc}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{hc}{\lambda'}\right)^2 - 2\left(\frac{hc}{\lambda}\right)\left(\frac{hc}{\lambda'}\right)\cos\theta, \quad (2.6.18)$$

由能量守恒得

$$m^2c^4 = \left(\frac{hc}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{hc}{\lambda'}\right)^2 - 2\left(\frac{hc}{\lambda}\right)\left(\frac{hc}{\lambda'}\right) + m_0^2c^4 + 2m_0c^2h\left(\frac{c}{\lambda} - \frac{c}{\lambda'}\right), \quad (2.6.19)$$

上两式相减得

$$m^2c^4\left[1 - \frac{v^2}{c^2}\right] = m_0^2c^4 - 2\left(\frac{hc}{\lambda}\right)\left(\frac{hc}{\lambda'}\right)(1 - \cos\theta) + 2m_0c^2h\left(\frac{c}{\lambda} - \frac{c}{\lambda'}\right), \quad (2.6.20)$$

由于 $m^2\left[1-\frac{v^2}{c^2}\right]=m_0^2$,因此

$$\left(\frac{h}{\lambda\lambda'}\right)(1 - \cos\theta) = m_0c\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right), \quad (2.6.21)$$

由此可得波长的改变为

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\theta) = \lambda_e(1 - \cos\theta). \quad (2.6.22)$$

这就是著名的康普顿散射公式.康普顿散射中射线波长的改变与原波长无关,只和散射角有关.当散射角为 90°时,散射波与入射波的波长差称为电子的康普顿波长 λ_e=0.002 426 21 nm.康普顿散射实验一直被认为是光的粒子性的有力证据之一,并且为独立测定普朗克常数 h 提供了一种方法.康普顿 1927 年因发现 X 射线被带电粒子散射获诺贝尔物理学奖.

按照上述理论,散射的 X 射线光子波长的改变完全由散射角 θ 决定.而实际观测到的光子改变了的波长有一个较宽的分布,其强度的峰值满足康普顿公式.这是因为电子在碰撞前静止的假设只是近似,实际上电子在原子中运动,有一定的动量,不同的动量将会导致不同的波长改变.如图 2.6.5 所示.

随着原子序数的增加,波长改变的谱线的强度逐渐减弱,而波长不变的谱线的强度逐渐增强.这是因为原子序数越高,原子中有更多的电子和原子核有较强的结合,可以近似地看作自由电子的只有最外壳层的几个,在电子的总数中比例越小.光子同结合强固的电子碰

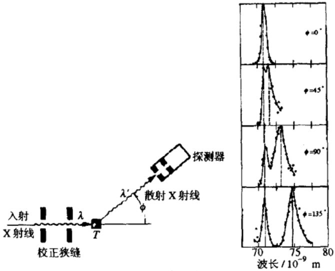


图 2.6.5　康普顿效应

撞就等于同质量很大的原子碰撞，波长改变很小，很难观测到，所以波长不变的谱线强度随原子序数而增加. 由于近似自由的电子数目相对减少，所以波长改变的谱线强度随原子序数增加而减弱.

例题 2.6.3　由康普顿散射公式求散射光子的能量和反冲电子的最大动能.

解　$\frac{1}{h\nu'}-\frac{1}{h\nu}=\frac{1}{m_0c^2}(1-\cos\theta)$，散射光子的能量为

$$h\nu' = \frac{m_0c^2}{1-\cos\theta+\frac{m_0c^2}{h\nu}},$$

反冲电子的动能为 $E_k=h\nu-h\nu'=h\nu\frac{1-\cos\theta}{1-\cos\theta+\frac{m_0c^2}{h\nu}}$，

其极大值为 $E_{kmax}=\frac{2h\nu}{2+\frac{m_0c^2}{h\nu}}$.

2.6.8　激光冷却和捕获中性原子[①]

康普顿效应明确地说明了光子具有动量. 利用光子具有动量，可

① 吉望西、王义道，物理，**25**(1996)28；王义道，物理，**27**(1998)131.

以用来冷却和捕获中性原子.所有用激光影响原子运动的过程,都基于原子对光子的吸收、再发射,或广义地说都基于散射而导致的反冲.

原子的激光冷却

最简单的激光冷却是多普勒冷却方式.一束激光迎着一束以速度 v 运动的原子照射过去,由于多普勒效应,激光频率 ω 应略小于原子静止时共振吸收的频率 ω_0:

$$\omega = \omega_0(1 - v/c). \tag{2.6.23}$$

吸收后原子以自发辐射的方式发出光子回到基态.然后再吸收光子,再自发辐射,这样重复下去.每次吸收一个光子,原子都得到与其运动方向相反的动量;而每次自发辐射,发射光子的方向却是随机的.因此多次重复后,吸收时得到的动量随吸收次数的增加而增加,而自发辐射损失的动量平均为零.原子由于反向动量的积累而减速.这就是多普勒冷却的基本原理.平均每次吸收-自发辐射循环,原子降低的速度为

$$\Delta v = -\frac{h\nu_0}{Mc}. \tag{2.6.24}$$

应用多普勒冷却原理可以使原子的热速度从室温下的几百米每秒降至很低,但是不能无限低下去,存在一个极限.由于原子的跃迁谱线的最窄宽度是原子能级寿命 Γ 决定的自然宽度,因此多普勒冷却方式不能最终移走对应自然半宽度的热运动能量:

$$k_B T_D = \frac{1}{2}Mv_D^2 = \frac{1}{2}\hbar\Gamma, \tag{2.6.25}$$

由此得到多普勒冷却的极限速度:

$$v_D = \sqrt{\frac{\hbar\Gamma}{M}}, \tag{2.6.26}$$

和多普勒冷却的极限温度:

$$T_D = \frac{\hbar\Gamma}{2k_B}. \tag{2.6.27}$$

要将原子冷却到多普勒冷却的极限温度以下,基本上都是在形成“光学粘胶”中依靠其他机制实现的.最典型的一种是偏振梯度冷

却，还有速度选择相干布居捕陷的冷却方式和拉曼冷却方式. 它们涉及比较复杂的量子效应，这里不再讨论.

原子阱

真正的原子阱是原子感受到一个势场区域，在该区域的内部某处原子的势能有极小值. 因此原子离开势能极小点总会受到迫使它返回的恢复力. 由于原子是电中性的，处于定态的原子一般没有电偶极矩，但是有磁矩. 实际的原子阱"阱深"都比较浅，只能捕陷热速度较低的原子. 一般对应温度远低于 1 K. 因此常常需要将原子预先冷却到足够低的温度后再"装入"原子阱中.

原子阱有"磁阱"、"激光阱"和"磁光阱". 所谓"四极磁阱"是由两个分开一定距离的对称的反向电流线圈组成的，其中心点的磁场为零. 沿各个方向离开中心点的磁场都逐渐增大. 具有磁矩的原子在这样的非均匀磁场中总是受一个指向中心点的恢复力. 预冷好的原子，进入四极磁阱区域，被一束对射的近共振短脉冲激光进一步减速后，立即接通磁场线圈电源建立磁阱，原子就能被捕获. 应用四极磁阱技术可将原子捕陷长达 20 min，捕陷原子数可高达 10^{12}. 通常"激光阱"是由三组六束组成的. 每一组两束具有高斯横向光强分布的激光束弱聚焦后对射，使它们的焦点互相错开，这样的光场中两种力起不同的作用：偶极梯度力由于光束横向光强的不均匀性垂直指向轴；散射力在轴向限制方面起主要作用. 原子从中心点无论向哪一边运动总是被这两种力推向中心点. 第三种原子阱是"磁光阱"，是上述两种机制的组合. 磁光阱 1987 年首次在实验中实现. 1995 年被用来实现碱金属原子的玻色-爱因斯坦凝聚.

激光冷却和捕获原子的应用

如果将原子热运动速度降至极低，并将其捕陷在一个极小的区域，那么一切由于原子运动所导致的谱线增宽都将被消除，原子谱线将实际上只具有自然宽度. 由于捕陷时间长，长时间观测研究可以大大提高观测的灵敏度. 这为高分辨光谱学开辟了新的前景，也使原子钟和量子频标的精度大大提高. 采用激光冷却和捕获原子技术可以形成大量"超冷"(温度可低至 20 nK)原子，这些超冷原子具有很多新的性质. 其中一重要现象就是玻色-爱因斯坦凝聚，大量的原子处

于相同的最低量子态. 1995年有三个小组相继在铷、锂和钠原子系统中实现了玻色-爱因斯坦凝聚,形成了"超冷原子物理"——一个非常具有生命力的新的研究领域. 将一束激光聚焦可以捕获大小为 0.02 ~ 10 μm 的粒子,可以直接在显微镜下操纵微粒. 在生物学中,选取适当的激光频率,使生物体对这个频率近乎透明,就可以在不伤害有机体的情况下,对活细胞内的染色体进行操纵. 朱棣文(Steven Chu)等人因此获得了1997年诺贝尔物理学奖.

习 题

2.6.1 求产生 0.126 nm 波长的 X 射线要在 X 射线管两端至少加多高电压.

2.6.2 一个 X 射线管的加速电压为 35 kV,求银靶所产生的 λ_{min} 和 K_α、K_β 线的波长. 银的原子序数 Z 为 47, K、L、M 原子的 X 能级分别为 25.51, 3.56 和 0.53 keV. 如果加速电压提高到 50 kV,结果如何?

2.6.3 波长 0.300 Å 的 X 射线被一电子产生 60°的康普顿散射,求散射光子的波长和散射后电子的动能.

2.6.4 一束能量为 0.500 MeV 的 X 射线被电子散射,设电子原来静止,散射后获得动能 0.100 MeV,求散射 X 射线的波长,以及散射 X 射线与入射 X 射线的夹角.

2.6.5 莫塞莱的实验是历史上首次精确测量原子序数的方法. 现在测得某些元素的 K_αX 射线的波长分别为0.1935、0.1787、0.1656和0.1434 nm,试确定这些元素的原子序数. 在这些系列中缺少哪一种元素? 计算该元素 K_α 线的波长.

2.6.6 钕原子($Z = 60$)的 L 吸收限为 0.19 nm,求钕原子中 K 电子的电离能.

2.6.7 以铝($Z = 13$)为靶子的 X 射线管产生的连续 X 射线的短波限为 0.50 nm,试问在这光谱中是否也能观测到其标识辐射的 K 系线? 若 X 射线连续谱的短波限为 1.0 nm,则情况又如何?

2.6.8 一个能量为 12 MeV 的光子被一个自由质子散射到垂直方向,求散射光子的波长.

2.7 外场中的原子

2.7.1 原子的磁矩

单个价电子原子的磁矩

内部饱和壳层的总轨道角动量和总自旋角动量都为零，对原子磁矩没有贡献，只考虑最外壳层的一个价电子. 电子的轨道磁矩和自旋磁矩分别与轨道角动量和自旋角动量成正比：

$$\mu_L = \gamma_L \boldsymbol{L}, \quad \mu_S = \gamma_S \boldsymbol{S}, \tag{2.7.1}$$

其中比例常数

$$\gamma_L = -g_L \frac{e}{2m_e}, \quad \gamma_S = -g_S \frac{e}{2m_e} \tag{2.7.2}$$

称为回磁比. 其中朗德 g 因子分别为 $g_L=1$ 和 $g_S\approx 2$. 由于 $g_L\neq g_S$，使得 $\gamma_L\neq\gamma_S$，则总磁矩

$$\mu = \mu_L + \mu_S \tag{2.7.3}$$

不再与总角动量

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} \tag{2.7.4}$$

反平行. 孤立原子的总角动量 $\boldsymbol{J}$ 是守恒量，而轨道角动量 $\boldsymbol{L}$、自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 和总磁矩 μ 不是守恒量，它们绕 $\boldsymbol{J}$ 旋进，不断改变方向. μ 在 $-\boldsymbol{J}$ 方向的分量 μ_J 是守恒量，因此一般将 μ_J 定义为总磁矩：

$$\begin{aligned}\mu_J &= \frac{(\mu_L + \mu_S)\cdot\boldsymbol{J}}{J^2}\boldsymbol{J} \\ &= \frac{\gamma_L\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J} + \gamma_S\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}}{J^2}\boldsymbol{J} = \gamma_J\boldsymbol{J},\end{aligned} \tag{2.7.5}$$

其中回磁比

$$\begin{aligned}\gamma_J &= \frac{\gamma_J\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J} + \gamma_S\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}}{J^2} \\ &= -\frac{g_L\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J} + g_S\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}}{J^2}\frac{e}{2m_e} = -g_J\frac{e}{2m_e},\end{aligned} \tag{2.7.6}$$

其中朗德因子

$$g_J = \frac{g_L \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J} + g_S \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}}{J^2} = \frac{\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J} + 2\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}}{J^2}$$

$$= \frac{(\boldsymbol{J}+\boldsymbol{S})\cdot\boldsymbol{J}}{J^2} = 1 + \frac{\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}}{J^2} = 1 + \frac{J^2 - L^2 + S^2}{2J^2}$$

$$= 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}, \qquad (2.7.7)$$

按量子力学 $J_z = m_J \hbar, m_J = j, j-1, \cdots, -j+1, -j$，磁矩和它在 z 方向的分量数值为

$$\mu_J = g_J \sqrt{j(j+1)}\mu_B,$$

$$\mu_{J_z} = g_J m_J \mu_B. \qquad (2.7.8)$$

多电子原子的磁矩

与单电子原子类似，多电子原子的总磁矩可定义为

$$\boldsymbol{\mu}_J = \gamma_J \boldsymbol{J}, \qquad (2.7.9)$$

其中
$$\gamma_J = \frac{\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{J}}{J^2} = \frac{(\boldsymbol{\mu}_{L_1} + \boldsymbol{\mu}_{S_1} + \boldsymbol{\mu}_{L_2} + \boldsymbol{\mu}_{S_2} + \cdots)\cdot\boldsymbol{J}}{J^2}. \qquad (2.7.10)$$

若用朗德因子 g_J 写成：

$$\gamma_J = -g_J \frac{e}{2m_e}, \qquad (2.7.11)$$

取每个电子的轨道和自旋 g 因子分别为 1 和 2，则有

$$g_J = \frac{(\boldsymbol{L}_1 + 2\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{L}_2 + 2\boldsymbol{S}_2 + \cdots)\cdot\boldsymbol{J}}{J^2}, \qquad (2.7.12)$$

$$g_J = \begin{cases} 1 + \dfrac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}, & LS\text{ 耦合} \\ g_{J_1}\dfrac{j(j+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{2j(j+1)} & \\ \quad + g_{J_2}\dfrac{j(j+1) - j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1)}{2j(j+1)}, & jj\text{ 耦合} \end{cases} \qquad (2.7.13)$$

其中 jj 耦合是两个电子的情况. g_{J_1}和 g_{J_2}是各个电子自旋-轨道耦合的因子. 求出两个电子 jj 耦合的 g_J，再代入这个公式，就可以求它们与第三个电子的 jj 耦合，如此就可求出多个电子 jj 耦合的 g_J. 按量

子力学 $J_z=m_J\hbar, m_J=j,j-1,\cdots,-j+1,-j$,磁矩和它在 z 方向的分量数值为

$$\begin{aligned}\mu_J &= g_J\sqrt{j(j+1)}\mu_B,\\ \mu_{Jz} &= g_J m_J \mu_B.\end{aligned} \tag{2.7.14}$$

例题2.7.1 计算原子处于 $^2D_{3/2}$ 态的朗德因子和 z 方向的磁矩.

解 $s=1/2, j=3/2, l=2, g=4/5, \mu_{Jz}=6/5\mu_B$.

2.7.2 塞曼效应

外场中类氢原子的哈密顿量

类氢原子的狄拉克方程为(2.3.8),在外磁场中哈密顿量还有一项:

$$H_4 = \frac{e}{2m}(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})\cdot\boldsymbol{B}, \tag{2.7.15}$$

H_4 可以作为微扰,如果外磁场较弱,不破坏原子内部的自旋-轨道耦合,满足 $H_4<H_1+H_2+H_3$,其能量在弱磁场中的一级修正为

$$\Delta E = \langle nsljm|H_4|nsljm\rangle = g_J m_J \mu_B B. \tag{2.7.16}$$

对不同总角动量磁量子数 m_J 能量修正不同,原来不同 m_J 简并的能级发生塞曼分裂.如果外磁场足够强,自旋-轨道耦合将被破坏,磁量子数 m_l, m_s 对应的简并能级被外磁场消除,发生不同于弱场的塞曼分裂.

塞曼效应

当外磁场 $\boldsymbol{B}$ 的作用比原子内轨道磁矩 μ_L 与自旋磁矩 μ_S 的耦合作用弱,原子内的轨道磁矩 μ_L 与自旋磁矩 μ_S 首先耦合成 μ_J,然后 μ_J 与磁场 $\boldsymbol{B}$ 耦合产生附加的能量.具有磁矩 μ_J 的原子,在外磁场 $\boldsymbol{B}$ 中有一附加能量:

$$\begin{aligned}E_m &= -\mu_J\cdot\boldsymbol{B} = -\gamma_J J_z B = g_J e m_J \hbar B/2m_e\\ &= g_J\mu_B m_J B,\end{aligned} \tag{2.7.17}$$

其中

$$m_J = j, j-1,\cdots,-j+1,-j. \tag{2.7.18}$$

于是能级 $E_{n,l,j}$ 对磁量子数 m_J 的简并消除，将发生分裂. 原子能级成为

$$E = E_{nlj} + E_m. \tag{2.7.19}$$

原子光谱谱线在外磁场中的分裂称为塞曼（P. Zeeman）效应. 跃迁前后两个原子态的总自旋都为零的谱线称为单态谱线(singlet line)，单态谱线在外磁场中分裂为三条的现象称为正常塞曼效应①②③④，塞曼 1896 年发现了此效应，由此他获得了 1902 年诺贝尔物理学奖. 对于所有非单态谱线在外磁场中的分裂称为反常塞曼效应.

考虑一个原子的两个能级 E_2 和 E_1 之间允许的量子跃迁，无外磁场时，跃迁的能量为：$h\nu = E_2 - E_1$. 在外磁场中，两个能级的能量分别为

$$\begin{aligned} E_2' &= E_2 + m_2 g_2 \mu_B B, \\ E_1' &= E_1 + m_1 g_1 \mu_B B. \end{aligned} \tag{2.7.20}$$

量子跃迁的光子能量为：

$$\begin{aligned} h\nu' &= E_2' - E_1' = (E_2 - E_1) + (m_2 g_2 - m_1 g_1)\mu_B B \\ &= h\nu + (m_2 g_2 - m_1 g_1)\mu_B B. \end{aligned} \tag{2.7.21}$$

当体系的自旋为零时为正常塞曼效应，此时 $g_2 = g_1 = 1$，

$$h\nu' = h\nu + (m_2 - m_1)\mu_B B. \tag{2.7.22}$$

依照选择定则 $\Delta m = m_2 - m_1 = 0, \pm 1$，只能有三条谱线：

$$h\nu' = h\nu + \begin{cases} \mu_B B, \\ 0, \\ -\mu_B B. \end{cases} \tag{2.7.23}$$

相邻两条谱线之间的频率间隔相等，频率间隔为

---

① G. Herzberg, Atomic Spectra and Atomic Structure, Prentice-Hall, Inc. 1944, 上海交通书店印, p104.

② Harald A. Enge, M. Russell Wehr, James A. Richard, *Introduction to Atomic Physics*, Addson-Wesley Publishing Company, California, 1978, p266.

③ Kenneth Krane, Modern Physics, John Wiley & Sons, New York 1983, p195.

④ Arthur Beiser, Concept of Modern Physics, 5th Ed., McGraw-Hill, Inc. New York, 1995, p223.

$$\Delta\nu = \frac{e\hbar B}{2hm} = \frac{eB}{4\pi m} = \tilde{L}. \qquad (2.7.24)$$

洛伦兹用经典理论解释了正常塞曼效应，算出了这个频率间隔，通常称这个频率间隔 $\tilde{L}=46.7\ \mathrm{m}^{-1}\cdot\mathrm{T}^{-1}$为洛伦兹单位.

在零磁场中能发生量子跃迁的两个能级，在外磁场中，每个能级都分裂成能级间隔为 $\Delta E=g_J\mu_B B$ 的 $2j+1$ 个子能级，对于 $S=0$ 的单态谱线，$g_2=g_1=1$，量子跃迁的光子能量完全由 m_2-m_1 决定，由于电偶极跃迁的选择定则为 $\Delta m=0,\pm1$，在外磁场中发生分裂的子能级间隔都等于 $\mu_B B$，尽管零磁场中两个能级之间只有一种跃迁，在外磁场中可能发生的跃迁数很多，但是只能有三种能量差值. 即每一条谱线只能分裂成三条，而且频率间隔等于一个洛伦兹单位. 这是产生正常塞曼效应的关键.

镉原子 (Cd) 6438 Å 谱线的正常塞曼分裂，是零磁场中原子态跃迁$^1D_2\to{}^1P_1$ 在外磁场中分裂的结果. 这两个原子态的 g 都等于 1，因此在外磁场中两个原子态分裂的子能级间隔都等于 $\mu_B B$，$^1D_2$ 和 $^1P_1$ 分别分裂成 5 个和 3 个子能级，这些子能级之间有 9 种可能的跃迁，但是只有三种能量差值，所以只出现三条分支谱线，每一条分支谱线包含三种可能的跃迁. 如图 2.7.1 所示.

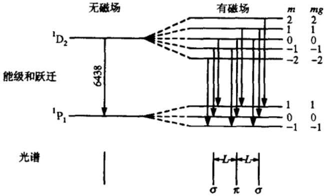


图 2.7.1 Cd $^1D_2\to{}^1P_1$ 谱线的正常塞曼效应

塞曼谱线的偏振特性

将原子和发射出的光子作为一个整体，角动量必须守恒[①]. 对于

① 杨福家，原子物理学，第二版，高等教育出版社，1990，129 页.

$\Delta m=m_2-m_1=1$,原子在磁场方向(z)的角动量减少了一个$\hbar$,光子必定具有在磁场方向的角动量$\hbar$,光的角动量方向和其传播方向相同,光的角动量方向和电矢量旋转方向组成左手螺旋定则,称为σ^+偏振;对于$\Delta m=m_2-m_1=-1$,原子在磁场方向的角动量增加了一个$\hbar$,光子必定具有在磁场相反方向的角动量$\hbar$,光的角动量方向和其传播方向相反,光的角动量方向和电矢量旋转方向组成右手螺旋定则,称为σ^-偏振.这两条偏振谱线电矢量的两个分量都在垂直于磁场的(xy)平面内,因此在平行于磁场的方向能观测到这两条圆偏振谱线.垂直于磁场的方向可以观测到由电矢量一个分量确定的线偏振谱线.对于$\Delta m=m_2-m_1=0$,原子在磁场方向(z)的角动量不变,光子必定具有在磁场垂直方向(设为x方向)的角动量$\hbar$,光的传播方向与磁场方向垂直,与光相应的电矢量必定在yz平面内,称为π偏振,可以有E_y和E_z分量,但是所有角动量方向在xy平面内的光子都满足$\Delta m=0$,因此平均效果将使E_y分量为零.于是沿磁场方向既观测不到E_y分量,也观测不到E_z分量,因此就观测不到$\Delta m=0$的相应的π偏振谱线,在与磁场垂直的方向上只能观测到E_z分量,即与磁场平行的π线偏振谱线.

反常塞曼效应

非单态谱线在外磁场中的分裂,称为反常塞曼效应.如果两个在零磁场中发生量子跃迁的能级,在外磁场中每个原子态发生能级分裂的子能级间隔不等$\Delta E_1\neq\Delta E_2$,则虽然电偶极跃迁的选择定则仍然是$\Delta m=0,\pm1$三种,但是可以出现多于三种不同的能量差值,因而零磁场中的一条谱线可能分裂成多条谱线;或者虽然一条谱线在外磁场中分裂为三条,而且频率间隔相等,但是不等于洛伦兹单位,此时跃迁前后两个原子态的总自旋必定不为零,也属于反常塞曼效应,见图 2.7.2.

钠原子 5896 Å 和 5890 Å 谱线在外磁场中的分裂就是反常塞曼效应.这两条谱线是$^2P_{1/2}$、$^2P_{3/2}\to{}^2S_{1/2}$跃迁的结果.$^2P_{1/2}$、$^2P_{3/2}$和$^2S_{1/2}$在外磁场中分裂成子能级间隔分别为$\frac{2}{3}\mu_B B$,$\frac{4}{3}\mu_B B$,$2\mu_B B$的 2,4,2 个子能级.在外磁场中原子态$^2P_{1/2}\to{}^2S_{1/2}$子能级之间可能的 4

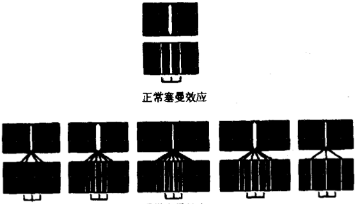


图 2.7.2　正常塞曼效应和反常塞曼效应. 注意在反常塞曼效应中谱线也可能分裂为三条，但是频率间隔不是一个洛伦兹单位

种跃迁的能量差值都不相等，因此分裂成 4 条谱线；原子态 $^2P_{3/2}\rightarrow {^2S_{1/2}}$ 子能级之间可能的 6 种跃迁的能量差值也都不相等，因此分裂成 6 条谱线，如图 2.7.3 所示.

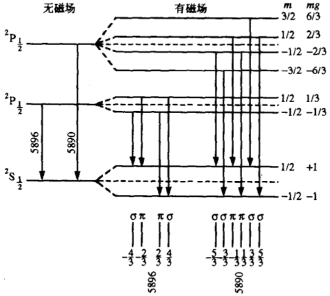


图 2.7.3　钠原子 5896 Å 和 5890 Å 谱线在外磁场中反常塞曼效应

例题 2.7.2　氦原子单态 $1s3d\,^1D_2\rightarrow 1s2p\,^1P_1$ 跃迁产生的谱线波长为 667.81 nm，在 $B=1.2$ T 的磁场中发生正常塞曼效应. (1) 垂

直于磁场方向观测有几条谱线?波长是多少?(2)迎着磁场方向观测有几条谱线?波长是多少?

解 两个单态之间跃迁产生的谱线为单态谱线,单态谱线在外磁场产生的分裂现象为正常塞曼效应.

(1)垂直于磁场方向可以观测到原谱线分裂为三条线偏振谱线,相邻谱线之间的频率差为一个洛伦兹单位,波长差为

$$\Delta\lambda = \lambda^2 \tilde{L}$$

$$= (667.81\ \text{nm})^2 \times 46.7\ \text{m}^{-1}\cdot\text{T}^{-1} \times 1.2\text{T} = 0.025\ \text{nm},$$

所以分裂后三条谱线的波长分别为:(667.81 + 0.025)nm,667.81 nm 和(667.81 + 0.025)nm.

(2)迎着磁场方向只能观测到两条 $\sigma^{\pm}$ 圆偏振谱线,中间的 π 谱线不再出现.相应谱线的波长仍然分别为(667.81 + 0.025)nm 和(667.81 + 0.025)nm.

例题 2.7.3 锌原子光谱增长的一条谱线($^3S_1 \to {}^3P_0$)在 $B=1.00$ T 的磁场中发生塞曼分裂.从垂直于磁场方向观测,原谱线分裂为几条?相邻两谱线的波数差等于多少?是否属于正常塞曼效应?

解 对于$^3S_1$ 原子态 $L=0,S=1$,因此朗德因子 $g=2$.在外磁场中能级分裂为三个能级相邻能级的间隔为 $2\mu_B B$.对于$^3P_0$ 原子态 $J=0$,因此朗德因子 g 不确定.由于 $J=0$,因此能级在外磁场中能级不分裂.所以原谱线在外磁场中分裂为三条,一条为 π 线($\Delta m_J=0$),两条为 σ 线($\Delta m_J=\pm 1$),沿垂直于磁场方向可以观测到这三条线.尽管由一条谱线分裂为三条谱线,由于跃迁前后原子态的自旋不为零,谱线分裂的间隔由$^3S_1$ 原子态能级分裂的间隔决定,为 $2\tilde{L}$,因此它不属于正常塞曼效应,而属于反常塞曼效应.

帕邢-巴克效应

外磁场足够强时,它的影响远远超过原子内部自旋-轨道相互作用.满足 $H_4 > H_1 + H_2 + H_3$,原子内部的自旋-轨道耦合被破坏,使自旋磁矩和轨道磁矩分别独立地与外磁场耦合,从而能级分裂与电子的量子数 m_l, m_s 有关,而与 m_j 无关,这样在足够强的外磁场中的能量修正为

$$\Delta E_m = \Delta E_L + \Delta E_S = m_l \mu_B B + 2m_s \mu_B B. \qquad (2.7.25)$$

对^{2}P 能级来说由于 LS 耦合被破坏，轨道角动量和强外磁场相互作用，分裂成三个轨道磁子能级，$m_l=1,0,-1$，磁子能级间隔为 $\mu_B B$，每一个轨道磁子能级又分两个自旋磁子能级，$m_s=1/2,-1/2$，自旋磁子能级间隔为 $2\mu_B B$，如图 2.7.4 所示. 对于^{2}S 能级，由于轨道

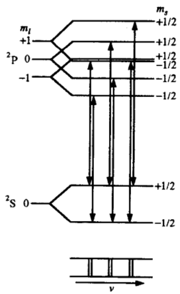


图 2.7.4　在强外磁场中钠原子^{2}P→^{2}S 跃迁的帕邢-巴克效应

量子数为零，在外磁场中，轨道磁能级只能有一个，这个轨道磁能级由于自旋角动量和外磁场的相互作用分裂成两个自旋磁子能级，$m_s=1/2,-1/2$. 根据跃迁选择定则：

$$\Delta m_l = 0, \pm 1, \quad \Delta m_s = 0 \qquad (2.7.26)$$

有 6 种可能的跃迁，但是只有三种不同的能量差值. 所以原来^{2}P→^{2}S 的一条谱线，在强外磁场中分裂成三条. 由弱外磁场中的反常塞曼效应过渡为强外磁场中的正常塞曼效应，即帕邢-巴克效应.

值得注意的是外磁场的强弱是相对的. 因为自旋-轨道相互作用的强弱随元素和量子数 n 而变. 例如外磁场 $B=\mu_0 H=3$ T 时，Na 原子的共振线 D 线由于自旋-轨道耦合形成的 D_1 和 D_2 线之间的间距仍然远大于 D_1 和 D_2 线每一条线自己在外磁场中的塞曼分裂，因此 3 T 的外磁场对 Na 的 D 线来说，仍然是弱场. 但是对于 Li 原子的共振线，由于自旋-轨道耦合形成的双线波长分别为 6707.85 Å 和

6708.00 Å，它们之间的间距为 0.333 cm^{-1}，而 3 T 的外磁场引起的分裂为 1.4 cm^{-1}，远大于自旋-轨道耦合形成的双线之间的间距，这时自旋-轨道耦合将被破坏. 帕邢-巴克效应将代替塞曼效应.

对类氢原子外磁场的强弱相对于不同量子数 n 和核电荷数 Z 而变，其弱场条件有人计算如下①：

$n=2$：　$Z=1$，　$B<1.6$ T；　$Z=2$，　$B<26$ T.

$n=3$：　$Z=1$，　$B<0.15$ T；$Z=2$，　$B<2.5$ T.

$n=4$：　$Z=1$，　$B<0.03$ T；$Z=2$，　$B<0.5$ T.

塞曼谱线的偏振

塞曼分裂的光谱线分为两类：一类由 $\Delta m_J=0$ 决定，称为 π 线，其线偏振面平行于外磁场；另一类由 $\Delta m_J=\pm1$ 决定，称为 σ 线，其线偏振面垂直于外磁场. 这三种跃迁的几率相同. 因此当激发态三个子能级上的粒子数相同时，三条谱线的辐射强度是相同的. 但是由于 π 线和 σ 线的偏振方向不同，所以从不同的方向观测，这三条谱线的强度是不同的. 沿磁场方向只能观测到 $\Delta m_J=+1$ 的电位移矢量逆时针旋转的左旋圆偏振光 σ^+ 线，和 $\Delta m_J=-1$ 电位移矢量顺时针旋转的右旋圆偏振光 σ^- 线，观测不到 $\Delta m_J=0$ 的 π 线. 在垂直磁场方向可以观测到线偏振光线 $\sigma^\pm$ 和 π 线.

例题 2.7.4　*已知钠原子的 D_1、D_2 线间隔为 1720 m^{-1}，求有效核电荷 Z. 在钠原子光谱线中，谱线 D_1 来自第一激发态 $3^2P_{1/2}$ 到基态 $3^2S_{1/2}$ 的跃迁，其波长为 5896 Å. 当钠原子放在磁场 B 中时，D_1 线将分裂成四条谱线. 设磁场 B 的强度为 0.2 T，求四重线中最短与最长的两条谱线之间的波长差.*

解　由于 LS 耦合形成的 D_1、D_2 线能量间隔为

$$\Delta E_{j\pm1/2}=\frac{Rhc\alpha^2Z^4}{n^3l(l+1)},$$

对钠原子 $n=3, l=1$.

又　　$$\Delta E_{j\pm1/2}=h\nu=\frac{hc}{\lambda}=hc\tilde{\nu},\quad \tilde{\nu}=1720\ \mathrm{m}^{-1},$$

由此计算有效核电荷 $Z=3.55$.

---

① 杨福家，原子物理学，第二版，高等教育出版社，1990，389 页.

原子能级在外磁场中的附加能量为

$$E_m = g_J m_J \mu_B B,$$

对于 $3^2S_{1/2}$，$m_J=\pm1/2$，$g_J=2$，塞曼能级分裂为 $\pm\mu_B B$；

对于 $3^2P_{1/2}$，$m_J=\pm1/2$，$g_J=2/3$，塞曼能级分裂为 $\pm1/3\mu_B B$.

最长波长谱线对应于 $3^2P_{1/2}$ 分裂后的低能级到 $3^2S_{1/2}$ 分裂后的高能级的跃迁，相应的能量差为

$$\Delta E_1 = \Delta E_0 - \frac{1}{3}\mu_B B - \mu_B B = \Delta E_0 - \frac{4}{3}\mu_B B;$$

最短波长谱线对应于 $3^2P_{1/2}$ 分裂后的高能级到 $3^2S_{1/2}$ 分裂后的低能级的跃迁，相应的能量差为

$$\Delta E_2 = \Delta E_0 + \frac{1}{3}\mu_B B - (-\mu_B B) = \Delta E_0 + \frac{4}{3}\mu_B B,$$

这两类光子的能量差为 $\Delta E = \frac{8}{3}\mu_B B$.

相应的的波长差为：

$$\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_2 = \frac{hc}{\Delta E_1} - \frac{hc}{\Delta E_2} \approx \frac{hc\Delta E}{\Delta E_0^2} = \frac{hc}{(hc/\lambda)^2}\left(\frac{8}{3}\mu_B B\right)$$

$$= \frac{\lambda^2}{hc}\left(\frac{8}{3}\mu_B B\right) = 1.7\ \text{Å}.$$

2.7.3 斯塔克效应

1913 年，斯塔克（J. Stark）观测到，在很强（$10^7\ \mathrm{V\cdot m^{-1}}$）的电场中，巴耳末线系各线分裂为若干成分. 原子在外电场中谱线发生分裂或移动的现象称为斯塔克效应(Stark effect). 斯塔克因此获 1919 年诺贝尔物理奖.

由于原子内部的电场约为 $10^{11}\ \mathrm{V\cdot m^{-1}}$，因此外加电场 E 的影响可以看成是微扰. 其微扰哈密顿量可以表示为

$$H' = AE + BE^2 + CE^3 + \cdots, \tag{2.7.27}$$

其中 A，B 和 C 是和原子状态有关的系数. E 的线性项表示一级斯塔克效应或线性斯塔克效应，E 的平方项表示二级斯塔克效应或平方斯塔克效应，等等.

线性斯塔克效应

很容易证明氢原子基态的固有电偶极矩为零,因此它在外加电场中不存在线性斯塔克效应. 但是对于 $n=2$ 的第一激发态,在不计及自旋时是四重简并的①. 此时,存在固有电偶极矩. 为了求出一级能量修正,必须计算 H' 在这四个简并态间的微扰矩阵元. 假设沿 z 轴方向外加均匀电场 E,它对带有电荷 $-e$ 的电子的作用能为

$$H' = eEz = eEr\cos\theta, \qquad (2.7.28)$$

由球谐函数的奇偶性可得,除 ψ_{200} 和 ψ_{210} 之间的微扰矩阵元不等于零外,其他微扰矩阵元都等于零.

$$H'_{12} = H'_{21} = -3eEa_0, \qquad (2.7.29)$$

代入简并微扰的久期方程:

$$\begin{vmatrix} -\lambda E^{(1)} & -3eEa_0 & 0 & 0 \\ -3eEa_0 & -\lambda E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda E^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \qquad (2.7.30)$$

即

$$(-\lambda E^{(1)})^2[(-\lambda E^{(1)})^2 - (3eEa_0)^2] = 0, \qquad (2.7.31)$$

这个方程的四个根为

$$\lambda E_{21}^{(1)} = 3eEa_0, \quad \lambda E_{22}^{(1)} = -3eEa_0,$$
$$\lambda E_{23}^{(1)} = \lambda E_{24}^{(1)} = 0. \qquad (2.7.32)$$

由此可见,在外加电场的作用下,原来四重简并的能级,在一级修正中分裂成了三个能级,这就是线性斯塔克效应.

平方斯塔克效应

碱金属原子的能级由于轨道贯穿和极化等效应的影响,它的能级对 l 是不简并的,这些能级相应状态的固有电偶极矩为零,因此不存在线性斯塔克效应. 但是在外加电场的作用下,原子中的电荷分布会发生微小的变化,产生感生电偶极矩,感生电偶极矩与外加电场 E 成正比,微扰哈密顿量为

---

① 曾谨言,量子力学导论,北京大学出版社,1992,249 页.

$$H' \propto E^2, \tag{2.7.33}$$

这就是二级斯塔克效应,或平方斯塔克效应.

2.7.4 磁共振(magnetic resonance)

电子顺磁共振

当磁矩不为零的原子处在外磁场 B 中时,由于原子的总角动量和外磁场的相互作用将引起能级的塞曼分裂,裂距 $\Delta E=\gamma_J \hbar B=g_J\mu_B B$. 若在垂直于外磁场的方向再加上一个频率为 ν 的电磁波,当它满足

$$h\nu = \gamma_J \hbar B = g_J\mu_B B \tag{2.7.34}$$

的条件时,电磁波的能量将会被强烈地吸收而发生共振现象,这是由于磁偶极跃迁产生的.

$$\nu(\text{GHz}) = \frac{\gamma_J \hbar}{h}B = \frac{\gamma_J}{2\pi}B(\text{T}). \tag{2.7.35}$$

通常磁场小于 1 T,此时频率为 GHz 量级,在微波波段. 通常将磁矩不为零的原子称为顺磁性原子,因此,这种共振也称为电子顺磁共振(electron paramagnetic resonance),简称 EPR. 在许多情况下,分子中的磁矩主要是由电子的自旋磁矩贡献的,轨道磁矩的贡献仅是很小的一部分,故又称为电子自旋共振(electron spin resonance),简称 ESR. 只有当分子上具有未成对电子时,总自旋磁矩才有可能不为零,所以电子自旋共振研究的对象必须是具有未成对电子的材料.

顺磁共振可精确测量电子的回磁比和朗德因子,也可以精确测量原子在基态和激发态的朗德因子,分析原子能级结构.

例题 2.7.5 基态钠原子处在磁场 B 中的微波谐振腔中,频率为 $\nu = 1.0\times10^{10}$ Hz 的电磁波经波导输入谐振腔. 磁场多强时,电磁波能量会被强烈吸收?

解 钠原子的基态为 $^2S_{\frac{1}{2}}$,$s=\frac{1}{2}$,$l=0$,$j=\frac{1}{2}$,$g=2$,$m_j=\pm\frac{1}{2}$,塞曼分裂的附加能量为 $\Delta E=m_j g\mu_B B=\pm\mu_B B$,当电磁场的能量量子满足 $h\nu=2\mu_B B$ 时发生共振吸收,因此,

$$B = \frac{h\nu}{2\mu_B} = 0.36\ \text{T}.$$

核磁共振[①]

在基态总角动量量子数 $J=0$ 的原子中，原子核磁矩与价电子之间的磁性耦合为零. 在这种情况下，如有外磁场，核自旋角动量就和外磁场相互作用，产生核能级的塞曼分裂，其子能级为：

$$E_I = m_I g_I \mu_N B. \tag{2.7.36}$$

原子核从外加电磁场中吸收能量，其量子态在这些核磁子能级之间发生的磁偶极跃迁称为核磁共振(nuclear magnetic resonance)，简称 NMR. 基态总角动量量子数 $J=0$ 的原子极少，惰性气体元素原子是其中最重要的. 但是基态 $J=0$ 的分子占分子的绝大多数. 这些分子中每个核磁矩不为零的核，都可以分别地发生核磁共振. 它们的核能级分裂仍然可以由上式表示. ^{131}Xe 原子核 $I=3/2, g_I=0.461$，其核磁子能级有 4 个，按照选择定则 $\Delta m_I=\pm 1$，核磁共振的跃迁发生在相邻核磁子能级之间，跃迁频率为

$$\nu = \frac{\Delta E_I}{h} = \frac{g_I \mu_N B}{h}. \tag{2.7.37}$$

^{14}N 原子核 $g_I=0.4036$，在 10^4 高斯外磁场中，核磁共振频率为 3.08 MHz. 氢原子核 $g_I=5.58$，所以共振频率为

$$\nu(\text{MHz}) = 42.58 B(\text{T}). \tag{2.7.38}$$

对于电子自旋

$$\nu(\text{GHz}) = 28.0 B(\text{T}). \tag{2.7.39}$$

例题 2.7.6 在核磁共振谱仪中，当共振频率调谐到 42.57 MHz 时，观测到含氢样品的共振吸收，求所加的磁场大小. 当调谐到 16.55 MHz 时，观测到^{7}Li 样品的共振吸收，已知 $g_H = 5.585, I_{^7\text{Li}} = 3/2$，计算^{7}Li 的 g 因子和磁矩值.

解 $B = \dfrac{h\nu}{g_H \mu_N} = 1\text{T}$,

$$|g_{^7\text{Li}}| = g_H \frac{\nu_{\text{Li}}}{\nu_H} = 2.171, \quad \mu_{^7\text{Li}} = |g_{^7\text{Li}}| I_{^7\text{Li}} \mu_N = 3.256 \mu_N.$$

---

① C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 6th Edition, John Wiley & Sons Inc., 1986, p461.

化学移位

研究发现，同一种原子核在原子的不同化合情况下，其核磁共振频率有微小的差别，以酒精分子中的 H 核磁共振谱线为例，如图 2.7.5 所示，它由相距很近的三条谱线组成. 谱线之间的间隔仅为共

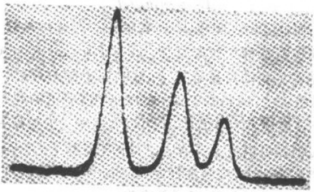


图 2.7.5　酒精分子的三条核磁共振谱线

振频率的 10^{-5}～10^{-6}量级. 三线的强度比为 3∶2∶1，研究发现，它直接来源于酒精分子结构的特点. 酒精的结构式为 CH_3—CH_2－OH. 其中有 6 个 H 原子，分为三组. CH_3 中三个 H 原子具有相同的化学环境；CH_2 中的两个 H 原子具有相同的化学环境；OH 中的一个 H 原子有完全不同的结合状态. 三条核磁共振谱线正是分别由这三组 H 原子核产生的. 这就表明价电子的不同的结合状态，对原子核的核磁共振频率会产生微小的影响，由此产生的频率移动，称为化学移位.

拉比实验

1938 年拉比(I. I. Rabi)提出了分子束(同样适用于原子束)磁共振法. 拉比实验的装置原理如图 2.7.6 所示：

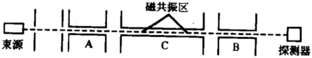


图 2.7.6　拉比原子束磁共振实验原理

在高真空系统中，在两个斯特恩-盖拉赫装置改进的磁能级选择器 A 和 B 之间安置磁铁 C 和射频设备，以实现磁共振. 只有具有磁

能级 m_1 的原子才能通过 A，只有具有磁能级 m_2 的原子才能通过 B，原子从束源出发，通过 A 的原子全部处于磁能级 m_1，如果在 C 区发生磁共振，原子吸收能量从磁能级 m_1 跃迁到磁能级 m_2，这些原子将通过 B，到达探测器被检测到. 如果不发生磁共振，则探测器无信号. 在原子束磁共振中，参与跃迁的原子数极少，但是只要有一个发生磁共振的原子能到达灵敏度足够高的探测器，就有可能被检测到. 整个设备可以具有很高的灵敏度. 用这种方法已经研究了大量原子基态的精细结构和超精细结构，测量了许多原子核的磁矩. 拉比方法的成功之处在于用分辨率很大、精确度很高的无线电技术直接测量核磁能级之间的间隔，测量误差可高达 10^{-5}以上. 拉比由于用共振方法测量原子核的磁性获得了 1944 年诺贝尔物理学奖.

磁感应法

拉比的分子束法的主要缺点是分子束的产生是非常困难的. 1946 年珀塞尔(E. M. Purcell)和布洛赫(F. Bloch)发现了不仅在分子束中而且在通常状态的物质中(固体、液体、少数情况下也用气体)也能观测到共振吸收现象，提出了不用分子束的核磁共振磁感应法. 此方法设备简单，而且在固体、液体和气体中都能适用. 磁感应法的实验装置如图 2.7.7 所示. 样品放在一个小试管中，试管放在一个螺线管线圈中，线圈的轴垂直于外加均匀磁场 H，H 的强度可以调节. 从射频发生器产生的电磁波通过样品管外的线圈，经射频放大器、检波器和低频放大器后在示波器中观测. 改变磁场 H 的强度，当发生共振时，会在示波器中显示出吸收峰.

珀塞尔(E. M. Purcell)和布洛赫(F. Bloch)由于核磁精密测量新方法的发展及有关的发现获得了 1952 年诺贝尔物理学奖.

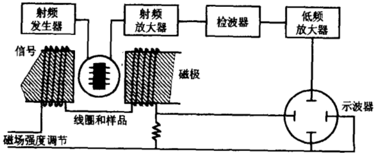


图 2.7.7　磁感应法装置的原理图

习　题

2.7.1　基态铯原子在 1.0 T 的磁场中，塞曼分裂的能量差是多少？若要使电子自旋转换方向，需要外加振荡电磁场的频率多大？

2.7.2　氦原子 $1s3p\,^1P_1 \to 1s2s\,^1S_0$ 跃迁产生的谱线的波长为 5016 Å，将氦原子置于"足够强"的磁场中，用一台分辨率 $(\lambda/\delta\lambda)$ 为 10^5 的摄谱仪才能清楚地拍摄到此谱线的塞曼分裂，试问磁场应达到什么强度才称得上"足够强"？

2.7.3　^{7}Li 基态的自旋为 3/2，核磁矩为 +3.26 核磁子. 将一个自由的 ^{7}Li 核放在 2.16 T 的磁场中. 由于空间量子化，它的基态将分裂成多少个能级？相邻能级的能级间隔多大？相邻能级间量子跃迁相应的波长多大？

2.7.4　某顺磁物质的原子在 $B=1.8$ T 的磁场中，当微波发生器的频率调到 2.01×10^{10} Hz 时观测到顺磁共振. 计算朗德因子，并指出原子处在何种状态.

2.7.5　在顺磁共振实验中，微波发生器的频率为 2.00×10^{10} Hz，当磁铁调到 $H=1.70\times10^5$ A/m 时，观察到铊原子（$^2P_{1/2}$态）的顺磁共振现象. 试由这些给出电子的荷质比.

2.8　分子结构

分立的原子在地球和低层大气中是很少的，仅仅惰性气体原子可以存在. 所有其他原子都结合成分子、液体或固体. 一些分子、液体和固体完全由相同原子组成，另一些则由不同原子组成. 一个分子是电中性的集团. 给定种类的分子总是有确定的成分和结构. 例如每个氢分子总是由两个氢原子组成的；每个水分子总是由一个氧原子和两个氢原子组成的. 两个或更多的原子可以形成分子. 如果分子中的某个原子被除去，或者另一个原子加入某个分子，将形成不同种类的分子并具有完全不同的性质.

分子的存在是由于它的能量小于分立的无相互作用原子相同的能量. 如果在某一原子集团中的相互作用降低它们的总能量，一个分子可以形成. 如果在某一原子集团中的相互作用增加它们的总能量，原子将相互排斥.

分子中原子与原子之间的作用力称为分子键（molecular

bond)，属于电磁作用，决定了分子的结构. 分子中的电子也遵从泡利不相容原理.

2.8.1 氢分子离子

最简单的分子是氢分子离子，由两个质子和一个电子组成.

绝热近似

在分子中，由于质子的质量比电子大三个数量级，质子的运动速度远小于电子，在考虑电子运动求电子云分布时，可以近似地忽略质子的运动，而在考虑质子的运动时，则可近似地认为电子对质子的反应足够快，电子云能够无改变地随质子一起运动. 在求解电子波函数时，假定各原子核在空间是相对静止的，核间距离只作为参数出现在薛定谔方程中，这种近似称为玻恩-奥本海默（J. Robert Oppenheimer）近似，或绝热近似.

电子波函数

在绝热近似中，对氢分子离子，电子在两个质子的静电场中运动，质子固定在确定的位置 a 和 b，它们对电子形成双势阱，当 a 和 b 相距很远时，双势阱之间的势垒较宽，电子只能束缚在 a 或 b，电子的波函数可以分别用氢原子的波函数 ψ_A 或 ψ_B 表示. 如果 a 和 b 不断靠近，势垒的宽度不断减小，由于隧道效应电子可以穿过势垒，电子在 a 和 b 附近出现的几率相等.

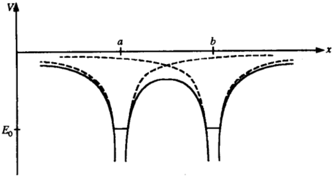


图 2.8.1 氢分子离子的双势阱

考虑到分子的电子波函数相对于两个质子的交换必须是对称或反对称的，1s 态波函数围绕质子 a 的称为 ψ_A，围绕质子 b 的称为 ψ_B，

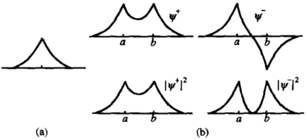


图 2.8.2 (a) 氢原子 1s 电子的波函数.(b) 对称波函数 ψ^+ 和反对称波函数 ψ^-.

氢分子离子的波函数可以用 ψ_A 和 ψ_B 的线性组合表示:

$$\psi^+ = \psi_A + \psi_B, \quad \psi^- = \psi_A - \psi_B. \qquad (2.8.1)$$

电子处于对称波函数 ψ^+ 态时[①],交换两个质子不影响波函数 ψ^+,电子在两个质子中间区域出现的几率较大,对两个质子起粘合剂作用,形成稳定的分子;电子处于反对称波函数 ψ^- 态时,电子在两个质子中间区域出现的几率较小,对两个质子不能起粘合剂作用,不能形成稳定的分子.

能量关系

利用波函数 ψ^+ 和 ψ^- 可以计算相应电子的能量 E_+ 和 E_-. 氢分子离子系统的总能量:

$$E^\pm = E_\pm + V_p, \qquad (2.8.2)$$

其中 V_p 为 a 和 b 之间的库仑排斥势能,$E_\pm$ 和 V_p 都依赖于 a 和 b 之间的距离 r.

当 $r \to \infty$ 时:

$$E_+ = E_- = -13.6\ \text{eV}. \qquad (2.8.3)$$

当 $r \to 0$ 时:

$$E_+ = -54.6\ \text{eV}, \quad E_- = -13.6\ \text{eV}. \qquad (2.8.4)$$

系统的总能量 $E^+ = E_+ + V_p$ 在 $r = r_0$ 处有一极小值 -16.3 eV. 显示可以形成稳定的氢分子离子,ψ^+ 态称为成键态. 在 ψ^- 态,系统具有

① Arthur Beiser, *Concept of Modern Physics*, 5th Ed., McGraw-Hill, Inc. New York (1995), p271.

较高的能量 $E^{-}=E_{-}+V_{p}$，能量没有极小值，不能形成稳定的系统，ψ^{-}态称为反键态.

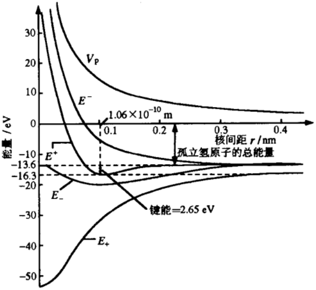


图 2.8.3　氢分子离子的能量

氢分子

氢分子中有两个电子和两个质子. 电子填充氢分子量子态 ψ^{+}的能级时，在基态按照泡利原理两个电子的自旋必须相反，形成稳定的氢分子. 这时电子的能量为 $2E_{+}$，随 r 的减小下降得比 E_{+}更快，因此氢分子的总能量 $E^{+}=2E_{+}+V_{p}$ 的极小点向左移，比氢分子离子的更小，能量更低.

2.8.2　共价键分子

结合成分子的每个原子的价电子不再属于某个原子而为所有原子"共有"，即属于整个分子，这种分子内原子的相互作用称为共价键(covalent bond). 共价键可分为双原子共价键和多原子共价键；根据构成共价键电子云中心的位置，又可分为非极性键和极性键. 共价键是一种强键，离解能一般为几个电子伏，有很强的方向性.

ss 共价键

原子外层单个 s 价电子形成的共价键称为 ss 共价键. 氢分子离

子是由最简单的共价键形成的.其中一个电子为两个质子所共有.氢分子中有两个电子,为两个质子所共有.这两个自旋相反的电子都可以处在成键态,从而形成稳定的氢分子.氢分子、碱金属原子组成的双原子分子(如 Na_2)、氢原子和碱金属原子组成的双原子分子(如 NaH)都是 ss 共价键分子.

pp 共价键

两个原子接近时,它们的 p 价电子轨道发生重叠,就会形成 pp 共价键. p 原子轨道有 p_x、p_y 和 p_z 三个.取两个原子的中心连线沿 x 轴,则 p_x 轨道的重叠大于 p_y 和 p_z 轨道的重叠.形成 p_x 的成键态 $p_{x+} \sim p_{Ax}+p_{Bx}$ 和反键态 $p_{x-} \sim p_{Ax}-p_{Bx}$,类似地可以确定 p_y 和 p_z 的成键态和反键态.

N_2 分子由两个电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^3$ 的 N 原子组成,每个 N 原子有三个 2p 价电子.在 N_2 分子中,6 个 2p 价电子正好填满 3 个 2p 成键分子轨道,形成极稳定的双原子分子.

O_2 分子由两个电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^4$ 的 O 原子组成,每个 O 原子有 4 个 2p 价电子.在 O_2 分子中,8 个 2p 价电子除填满 3 个 $2p$ 成键分子轨道外,还有两个电子填入 p_y、p_z 的反键轨道,所以 O_2 不如 N_2 稳定,键容易被打开,与周围的分子发生化学反应.

F_2 分子由两个电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^5$ 的 F 原子组成,每个 F 原子有 5 个 2p 价电子.在 F_2 分子中,10 个 2p 价电子除填满 3 个 2p 成键分子轨道外,还有 4 个电子填入 p_y 和 p_z 的反键轨道,所以 F_2 比 O_2 还不稳定,键很容易被打开,与许多原子极易发生化学反应.其离解能 $E_B=1.6$ eV,比可见光光子的能量 2~4 eV 还小,因此 F_2 分子在光照下容易分解为 F 原子.其余卤素元素如 Cl、Br、I 和 At,也形成 pp 共价键双原子分子,很像 F_2 分子,极易发生化学反应或被光分解.

sp 分子键

s 价电子的原子和 p 价电子的原子接近,原子轨道发生重叠,有可能形成 sp 分子键.

在 HF 分子中,H 原子的价电子是 $1s^1$,F 原子的价电子为 $2p^5$,其中三个自旋向上填入 p_x、p_y 和 p_z 原子轨道,另外两个电子自旋向下可以再填入 p_x、p_y 和 p_z 中的两个原子轨道.这样有一个自旋向上

的 2p 电子未配对，和 H 原子的 $1s^1$ 电子波函数重叠形成 sp 成键分子轨道和反键分子轨道. H 原子和卤素原子形成分子时形成 sp 分子键.

在 H_2O 分子中，H 原子的价电子是 $1s^1$，O 原子的价电子为 $2p^4$，其中三个自旋向上填入 p_x、p_y 和 p_z 原子轨道，第 4 个电子自旋向下可以再填入 p_x、p_y 和 p_z 中的一个原子轨道. 这样有两个自旋向上的 2p 电子未配对，和两个 H 原子的 $1s^1$ 电子波函数重叠形成 sp 成键分子轨道和反键分子轨道. 这种分子键称为直接键. 由于两个 H 原子电子之间的库仑排斥，两个 sp 分子键之间的夹角大于 90°，对 H_2O 分子为 104.5°.

sp 杂化轨道

C 的电子组态为 $1s^22s^22p^2$，若价电子为 $2p^2$，则可以形成 sp 直接键分子 CH_2，键角接近 90°，与 H_2O 分子相似. 实际上在 CH_4 和金刚石中，C 有 4 个相等的键，呈 4 面体结构，C 原子在 4 面体中心. 这是因为在周围原子的作用下，C 原子中的一个 2s 电子激发到 2p 态，形成 $2s^12p^3$ 组态，这 4 个电子实际的原子波函数已不是纯粹的 2s 波函数和 2p 波函数，而是它们的线系叠加，称为 sp^3 杂化轨道(hybrid orbitals).

杂化后的 4 个分子轨道的电子云，就像从正 4 面体中心伸向 4 个顶点的 4 条臂，相邻两条臂之间打开夹角为 109.5°. 半导体材料 Si 和 Ge 晶体也是金刚石结构，原子之间的共价键也是 sp^3 杂化. 类似地有 sp^2 杂化，其中一个 2s 电子和两个 2p 电子形成正三角形杂化，相邻两个杂化轨道之间的夹角为 120°，而第三个 2p 电子仍在原来的 2p 态，形成 pp 共价键. 在石墨和乙烯中的 C 原子就属这种情况. 还有 sp 杂化，其中一个 2s 电子和一个 2p 电子形成正杂化，相邻两个杂化轨道之间的夹角为 180°，而其余两个 2p 电子仍在原来的 2p 态，形成 pp 共价键. 在乙炔中的 C 原子就属这种情况.

2.8.3 其他化学键

离子键

一个原子的价电子转移到另一个原子，形成正负离子，依靠正负

离子间的静电吸引作用形成分子，称为离子键(ionic bond). 离子键是强键，离解能也是几个电子伏. NaCl 分子是典型的离子键分子. 但是 Na^+和 Cl^-的电子云有一定的重叠，重叠部分的电子属于两个离子共有，因此 NaCl 分子中仍然有一定比例的共价键成分.

由于电子的波动性，两个离子的电子云之间总会有重叠，所以总会有共价键成分，纯粹的离子键是不存在的. 测量分子的电偶极矩，可以判断离子键所占的比率. 例如 NaCl 分子，若是纯共价键，其电偶极矩 p 等于零. 而若是纯离子键，则从原子间距 $r_0 = 2.36$ Å 可以算出：$p=er_0=3.78\times10^{-29}$ C·m. 实验测得 NaCl 分子电偶极矩为 $p_{exp}=3.00\times10^{-29}$ C·m. 常用分子电偶极矩的测量值 p_{exp}与理想值 er_0 之比表示离子键所占的比率，称为电离度. NaCl 分子的电离度为 79%，表示大部分是离子键. 实验测得 HCl 分子的电偶极矩为 0.360×10^{-29} C·m，$r_0=1.28$ Å，由此可以算出其电离度为 17.6%，表示 HCl 分子大部分为共价键.

氢键

在某些条件下，一个氢原子可以受到两个原子的强烈吸引，在两个原子之间构成氢键(hydrogen bond). 氢键的键能为 0.1 eV 量级. 氢键的主要特征是离子性的，在氢键极端的离子性形式下，氢原子失去它的电子，交给分子中另一个原子，裸露的质子构成氢键. 二氟化氢离子由于形成氢键而稳定.

氢键是水分子间相互作用的一个重要组成部分，并且与电偶极矩静电吸引共同引起水和冰的特异物理性质. 氢键约束蛋白质分子，使之保持其正常的几何排列. 它在氟化氢和甲酸的聚合过程中起决定作用，也在某些铁电晶体中起重要作用.

范德瓦耳斯键

在所有的原子和分子之间都存在范德瓦耳斯键(Van der Waals bond)，范德瓦耳斯键是一种瞬时的电偶极矩的感应作用. 往往产生于原来具有稳固电子结构的原子或分子之间. 如具有满壳层结构的惰性气体元素，或价电子已用于形成共价键的饱和分子. 它们结合为晶体时基本上保持原来的电子结构. 其结合能一般在 0.1 eV 左右.

金属键

金属键(metal bond)是金属中的传导电子和金属晶格上的金属

离子之间的相互作用形成的.在气体分子中没有金属键.由于传导电子所形成的键不很强,在碱金属中原子之间的间距相当大,因为大的原子间距之下传导电子的动能较低,这种情况导致弱的结合.金属倾向结晶为紧密堆积的结构.

2.9 分子内部运动的能级和光谱

2.9.1 双原子分子的能级和光谱

分子的内部运动

分子内部不仅有电子的运动,还有分子的转动和内部的振动①.这三种运动相互关联,问题很复杂.我们可以粗略估计分子内部这三种运动能量的量级.

电子运动能量 E_e: 分子的大小约为 $a \sim 0.1\ \mathrm{nm}$,电子在分子范围内运动,其坐标不确定度为 a,根据不确定关系,动量不确定度为 $\hbar/a$,因此,电子的能量

$$E_e = \frac{p^2}{2m} \sim \frac{(\Delta p)^2}{m} \sim \frac{\hbar}{ma^2} \sim 10\ \mathrm{eV}, \qquad (2.9.1)$$

这一能量对应的电子跃迁的频率处于光谱的可见光区和紫外区.

振动能量 E_v: 谐振子的能量

$$E_v = \hbar\omega = \hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}, \qquad (2.9.2)$$

其中 μ 为典型核的质量,k 为分子谐振子的劲度系数.k 的数量级可以这样估计,使谐振子有分子大小的位移时,会使得电子的波函数发生显著的变化,从而引起电子能量的改变,因此,$k \sim E_e/a^2$,典型的核的质量大约是电子质量的 $10^4 \sim 10^5$ 倍.因此 E_v 约为 E_e 的 1/100.对应的分子振动跃迁频率处于近红外区域.

转动能量 E_r: 分子的转动惯量数量级为 μa^2,角动量的量级为 $\hbar$,因此分子的转动能量为

---

① 甄长荫、陈熙谋、胡镜寰,原子物理学学习指南,高等教育出版社,1993 年 4 月.

$$E_r = \frac{p_\varphi^2}{2I} \sim \frac{\hbar^2}{\mu a^2}, \tag{2.9.3}$$

约为电子运动能量 E_e 的 10^{-4}，对应的分子转动跃迁频率处于远红外或微波区域.

由于原子核的质量远大于电子的质量，因此电子运动的频率远大于分子振动和转动的频率，在考虑电子运动时，可以认为原子核固定不动，分子既没有振动，也没有转动；研究分子振动时，可以认为分子没有转动，而电子处于稳定的运动，用有效电子云来代替；研究分子转动时，原子核处于振动的平衡位置. 分子的总能量是三者之和 $E=E_e+E_v+E_r$.

双原子分子的转动能级和光谱

假定双原子分子是刚性分子(rigid molecule)，即原子间的距离不变，并且原子绕通过质心连线的垂直轴转动，I 为分子绕质心的转动惯量(moment of inertia)：

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu R^2, \tag{2.9.4}$$

μ 为约化质量(reduced mass)：

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \tag{2.9.5}$$

$R=r_1+r_2$ 为两个原子之间的距离. 转动惯量方程表示双原子分子的转动等价于质量为 μ 的单粒子围绕和它相距 R 的轴的转动. 分子的角动量为

$$L = I\omega, \tag{2.9.6}$$

这里 ω 为它的角速度(angular velocity). 我们用转动量子数 J (rotational quantum number)来表示角动量量子化：

$$L = \sqrt{J(J+1)}\,\hbar, \quad J = 0,1,2,3,\cdots \tag{2.9.7}$$

转动分子的能量为

$$E_r = \frac{1}{2} I\omega^2 = \frac{L^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1), \quad J=0,1,2,3,\cdots \tag{2.9.8}$$

能级间隔为

$$\Delta E_r = [(J+1)(J+2) - J(J+1)]\frac{\hbar^2}{2I} = \frac{(J+1)\hbar^2}{I}. \tag{2.9.9}$$

能级间隔随量子数 J 的增大而加宽，如图 2.9.1 所示.

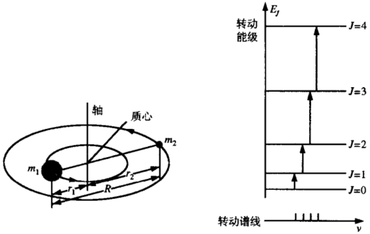


图 2.9.1　双原子分子的转动和转动能级

实验和理论都证明分子转动能级之间的电偶极辐射跃迁的选择定则为

$$\Delta J = \pm 1, \tag{2.9.10}$$

即能级跃迁只可能发生在相邻的能级之间. 实际上分子的转动谱线总是在吸收光子时被观测到. 因此每一条转动谱线总是从量子数为 J 的初态吸收光子跃迁到下一个量子数为 $J+1$ 的较高动能态. 转动光谱线光子的波数为

$$\tilde{\nu}_r = \frac{\Delta E_r}{hc} = \frac{(J+1)\hbar^2}{Ihc} = \frac{(J+1)h}{4\pi^2 Ic} = 2B(J+1), \tag{2.9.11}$$

其中

$$2B = \frac{h}{4\pi^2 Ic}, \tag{2.9.12}$$

谱线波数的间隔是相等的，都是 $2B$. 从光谱推算 B 值，就可以算出转动惯量 I，从而算出原子核的距离 r_0. HCl 远红外吸收谱中观测到很多条谱线，这些光谱线波数的间隔 $2B$ 为 20.68 cm^{-1}，由此推算出核间距为 1.29 Å.

例题 2.9.1　CO 分子转动吸收跃迁 $J=0 \rightarrow J=1$ 的转动谱线频率为 1.15×10^{11} Hz，求 CO 分子的键长. ^{12}C 和 ^{16}O 原子的质量分别

为 1.99×10⁻²⁶ kg 和 2.66×10⁻²⁶ kg.

解　转动谱线吸收光子的频率为

$$\nu_{J\to J+1}=\frac{\Delta E_r}{h}=\frac{E_{J+1}-E_J}{h}=\frac{\hbar}{2\pi I}(J+1),$$

CO 分子的转动惯量

$$I=\frac{L}{\omega}=\frac{\hbar}{2\pi\nu}(J+1)=\frac{1.054\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}}{(2\pi)(1.15\times10^{11}\mathrm{s}^{-1})}$$

$$=1.46\times10^{-46}\,\mathrm{kg\cdot m^2},$$

CO 分子的约化质量为

$$\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}=\left[\frac{1.99\times2.66}{1.99+2.66}\right]\times10^{-26}\,\mathrm{kg}=1.14\times10^{-26}\,\mathrm{kg},$$

CO 分子的键长为

$$R_{CO}=\sqrt{\frac{I}{\mu}}=\sqrt{\frac{1.46\times10^{-46}\,\mathrm{kg\cdot m^2}}{1.14\times10^{-26}\,\mathrm{kg}}}$$

$$=1.13\times10^{-10}\,\mathrm{m}=0.113\,\mathrm{nm}.$$

双原子分子的振动能级和光谱

研究双原子分子(diatomic molecule)的振动能级(vibrational energy levels)时,通常最初采用谐振子(harmonic oscillator)模型①.当分子振动能量较低时,分子在平衡距离 r_0 附近作简谐振动,其势能可表示为

$$U(r)=U_0+\frac{1}{2}k(r-r_0)^2,\tag{2.9.13}$$

式中 r 为两个原子核之间的距离,k 为分子的劲度系数.如图 2.9.2 所示.

这是一个线性谐振子问题,其能量是量子化的:

$$E_v=\left(v+\frac{1}{2}\right)h\nu_a,\tag{2.9.14}$$

其中 v 为振动量子数,$v=0,1,2,3,\cdots$, ν_a 为分子简谐振动的频率

$$\nu_a=\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}},\tag{2.9.15}$$

① Arthur Beiser, Concept of Modern Physics, 5th Ed., McGraw-Hill, Inc. New York (1995), p284.

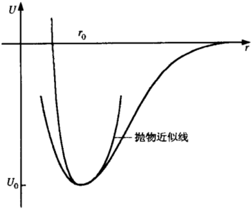


图 2.9.2 分子振动的简谐近似

$\mu=\dfrac{m_1m_2}{m_1+m_2}$为分子的约化质量.

例题 2.9.2 当 CO 溶解在液态的四氯化碳中，频率为 6.42×10^{13} Hz 的红外辐射被吸收.四氯化碳不吸收这个频率辐射，因此必定是 CO 吸收了这个频率的红外辐射.求 CO 分子中键的力常数和振动能级间隔.

解 CO 的约化质量为 1.14×10^{-26} kg，因此力常数为

$$k=4\pi^2\nu_0^2\mu=4\pi^2(6.42\times10^{13}\,\text{Hz})^2(1.14\times10^{-26}\,\text{kg})$$
$$=1.86\times10^3\,\text{N/m}.$$

CO 中振动能级间隔为

$$\Delta E=E_{v+1}-E_v=h\nu_0=(6.63\times10^{-34}\,\text{J}\cdot\text{s})(6.42\times10^{13}\,\text{Hz})$$
$$=4.26\times10^{-20}\,\text{J}=0.266\,\text{eV}.$$

双原子分子的振-转能级和光谱

纯的振动光谱仅仅在液体中观测到.因为分子转动的激发能远小于分子的振动激发能，液体中相邻分子之间的相互作用禁止分子转动.在气体或蒸气中的自由运动的分子几乎总是在转动，无论分子在什么振动状态.这样分子的光谱不是显示和每一个振动跃迁相关的孤立的谱线，而是属于一个振动能级有大数量的由于转动能级之间跃迁产生的间隔很小的密排的谱线.用分辨率不高的光谱仪得到的分子光谱中，这些表现为宽斑纹的谱线称为振动-转动带.

对于一级近似，分子的振动和转动相互独立，我们也可以忽略离

心的变形和非简谐效应. 在这种条件下双原子分子的能级可以表示为

$$E_{v,J} = \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}} + J(J+1)\frac{\hbar^2}{2I}. \qquad (2.9.16)$$

图 2.9.3 显示双原子分子对于 $v=0$ 和 $v=1$ 振动态的 $J=0,1,$

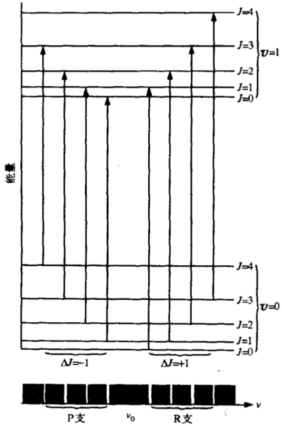


图 2.9.3 双原子分子中 $v=0 \to v=1$ 振动跃迁的转动谱. 由于选择定则 $\Delta J=\pm 1$, 这里没有 $\nu=\nu_0$ 谱线的 Q 支

2,3,4的转动能级和吸收谱线,满足选择定则 $\Delta v=\pm 1$ 和 $\Delta J=\pm 1$. $v=0 \to v=1$ 的振动跃迁分成两种: $\Delta J=-1$,也就是 $J \to J-1$ 的称为 P 支, $\Delta J=1$,也就是 $J \to J+1$ 的称为 R 支,在 P 支中谱线的频率为:

$$\nu_P = \frac{E_{1,J-1} - E_{0,J}}{h} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} + [(J-1)J - J(J+1)]\frac{\hbar}{4\pi I}$$

$$= \nu_0 - J\frac{\hbar}{2\pi I}, \tag{2.9.17}$$

它们的波数为

$$\tilde{\nu}_P = \frac{1}{\lambda_P} = \frac{\nu_P}{c} = \tilde{\nu}_0 - 2BJ, \tag{2.9.18}$$

其中 $J=1,2,3,\cdots$,

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}}, \quad 2B = \frac{\hbar}{2\pi Ic}, \tag{2.9.19}$$

在 R 支中谱线的频率为

$$\begin{aligned} \nu_R &= \frac{E_{1,J+1} - E_{0,J}}{h} \\ &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} + [(J+1)(J+2) - J(J+1)]\frac{\hbar}{4\pi I} \\ &= \nu_0 + (J+1)\frac{\hbar}{2\pi I}, \end{aligned} \tag{2.9.20}$$

其中 $J=0,1,2,3,\cdots$. 波数为 $\tilde{\nu}_R = \tilde{\nu}_0 + 2B(J+1)$.

在双原子分子中 $\Delta J=0$ 的跃迁是禁止的,因此没有 $\nu=\nu_0$ 的振动谱线. ν_0 是振动-转动光谱带中的一个空位,称为光谱带的基线,基线是一个空缺,很容易认出. 这种吸收谱线带的特征是从中央基线对称地向两侧排开,间距是均匀的. 图 2.9.4 显示在 CO 分子中 $v=0 \to v=1$ 的振动-转动吸收带. ①

例题 2.9.3 HCl 分子有一个近红外光谱带,其相邻的几条谱线的波长是 2925.78, 2906.25, 2865.09, 2843.56, 2821.49 cm^{-1}, H 和 Cl 的原子量分别为 1.008 和 35.46,试求 HCl 分子的劲度系数 k 和键长 r_0,忽略分子的非简谐修正和非刚性修正.

解 HCl 的约化质量为 $\mu = 1.628\times10^{-27}$ kg,由于给出的谱线波数差中 $\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_3$ 大约等于其余波数差的两倍,因此基线在 $\tilde{\nu}_2$、$\tilde{\nu}_3$ 之间,$\tilde{\nu}_0 = \frac{1}{2}(\tilde{\nu}_2 + \tilde{\nu}_3) = 2885.67\ cm^{-1}$,

① Arthur Beiser, Concept of Modern Physics, 5th Ed., McGraw-Hill, Inc. New York (1995) p290.

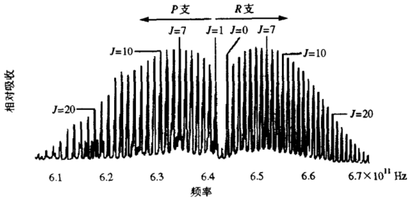


图 2.9.4　在 CO 分子中 $v=0\to v=1$ 的高分辨振动转动吸收带.

基线为振动波数：$\tilde{\nu}_0=\frac{1}{2\pi c}\cdot\sqrt{\frac{k}{\mu}}$，　$k=4\pi^2c^2\mu\tilde{\nu}_e^2=481.8\ \mathrm{N/m}$.

相邻两波数差为 $2B$，$B=\frac{h}{8\pi^2 Ic}=\frac{h}{8\pi^2\mu r_0^2 c}=10.52\ \mathrm{cm}^{-1}$，

$$r_0=1.278\ \text{Å}.$$

例题 2.9.4　HBr 分子的远红外吸收光谱是一些 $\Delta\tilde{\nu}=16.94\ \mathrm{cm}^{-1}$ 等间隔的光谱线，求 HBr 分子的转动惯量及原子核间的距离. 已知 H 和 Br 的原子量分别为 1.008 和 79.92.

解　$2B=16.94\ \mathrm{cm}^{-1}$，　$\mu=\frac{1.008\times79.92}{1.008+79.92}\times1.66\times10^{-27}\ \mathrm{kg}$，

$$B=\frac{h}{8\pi^2\mu r_0^2 c},r_0=1.41\ \text{Å},I=\mu r_0^2=3.30\times10^{-47}\ \mathrm{kg\cdot m^2}.$$

HCl 有一个近红外吸收带，基线波长为 3.46 μm，波数为 2885.9 cm^{-1}(1-0 谱带). 由光谱线距离求得 B 值为 10.4400 cm^{-1}，相应的原子核间距为 1.2838 Å. B 值随振动能级变化，可以表示为

$$B_v=B_e-(v+1)\alpha_e, \qquad (2.9.21)$$

B_e 为平衡距离的 B 值. α_e 称为转动常数.

如果电子能量、振动能量和转动能量都改变，则形成电子振动-转动谱带，这时 J 的选择定则为 $\Delta J=\pm1,0$($J'=0$ 到 $J=0$ 除外). 这样一个谱带中的谱线除去 $\Delta J=-1$ 的 R 支和 $\Delta J=1$ 的 P 支外，还多了一个 $\Delta J=0$ 的 Q 支.

2.9.2 拉曼散射

当光穿过密度不均匀的介质或由热运动而引起的密度涨落的介质时，常常发生光的散射，这一散射称为瑞利(Rayleigh)散射，瑞利散射光的频率与入射光的频率相同. 1928 年印度科学家拉曼(C. V. Raman)发现分子的散射光中，具有与入射光不同频率的成分，研究发现，频率的改变与入射光的频率无关，而与分子的振动、转动能级有关. 这就是拉曼效应. 在光子和分子碰撞过程中，分子吸收了入射光子，分子内部的能级改变，同时反射出一个光子，其频率不同于入射光子的频率，因此拉曼散射是一次二级过程. 频率比入射光频率低的散射光谱线称为斯托克斯线；频率比入射光频率高的散射光谱线称为反斯托克斯线. 由于拉曼散射的光源可以选择，所以可以在紫外或可见光范围观测分子的振动和转动光谱. 与分子转动能级跃迁相联系的拉曼光谱称为纯转动拉曼光谱，与分子振-转能级跃迁相联系的拉曼光谱称为振-转拉曼光谱. 拉曼因发现光散射的拉曼效应获 1930 年诺贝尔物理学奖.

HCl 的拉曼光谱

图 2.9.5 上部显示汞的一部分光谱. 下部并列着的是这部分光谱经 HCl 散射后的拉曼光谱.

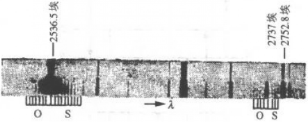


图 2.9.5　HCl 气体中的拉曼散射，上图是汞光谱，下图是拉曼光谱

在汞 2536.5 Å 谱线右边出现了一条较强的新谱线，测得它的波长是 2737 Å，这两条谱线的波数之差为 2886 cm^{-1}，正好与 HCl 红外振动谱带的波数相同. 这是由于波长为 2536.5 Å 汞的谱线，经 HCl 分子散射后，有一部分能量被 HCl 分子吸收，使 HCl 分子的振动能级从 $v=0$ 跃迁到 $v=1$，波长为 2536.5 Å 汞的谱线失去这部分

能量后变成了波长为 2737 Å 的谱线，当然在一定的条件下，入射光子也可能吸收 HCl 分子的从振动能级 $v=1$ 跃迁到 $v=0$ 所放出的能量，使其波长变短.

在 2536.5 Å 和 2737 Å 谱线的两侧都有较弱的小间隔谱线，每侧两邻线的波数差 p 是相等的. 近中心线的两线与中心线的波数差等于邻线波数差的一倍半. 这些较弱谱线的波数差可以表示为

$$\tilde{\nu}' - \tilde{\nu} = \pm \left(\frac{3}{2} + n \right) p, \quad n = 0,1,2,\cdots \qquad (2.9.22)$$

测得 $p = 41.64\ \mathrm{cm}^{-1}$，很接近 HCl 分子常数 B 的实验值的 4 倍. 将上式中的 p 写作 $4B$ 得到

$$\tilde{\nu}' - \tilde{\nu} = \pm (6 + 4n)B = \pm 6B, \pm 10B, \pm 14B, \cdots,$$
$$n = 0,1,2,\cdots \qquad (2.9.23)$$

这个公式是拉曼散射小间隔的普遍规律，可以从转动能级的跃迁说明. 只是这种跃迁的选择定则与分子转动跃迁的红外谱不同. 从观测到的现象可以推得

$$\Delta J = 0, \pm 2, \qquad (2.9.24)$$

其中 $\Delta J = 0$ 相当于中心谱线，$\Delta J = \pm 2$ 是两侧的较弱谱线. 图 2.9.6 说明这个定则与观测到的现象一致. 由此可见，拉曼光谱与转动光谱描述的是不同的两个过程.

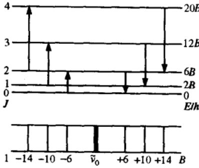


图 2.9.6 拉曼散射中的转动跃迁和光谱

转动拉曼光谱

散射光频率的改变伴随着分子转动能级间的跃迁，它出现在靠近瑞利线的两侧. 转动能级跃迁的选择定则为

$$\Delta J = 0, \pm 2, \qquad (2.9.25)$$

其中 $\Delta J=0$ 对应于瑞利线，$\Delta J=+2$ 对应于斯托克斯线，构成 S 支；$\Delta J=-2$ 对应于反斯托克斯线，构成 O 支. 散射光与入射光的波数差为

$$\Delta\tilde{\nu} = \pm B(4J+6), \quad J = 0,1,2,\cdots. \qquad (2.9.26)$$

测定散射线的波数可确定分子的转动常数，从而提供电子转动惯量和分子键长的信息.

振-转拉曼光谱

散射光频率的改变伴随着分子振-转能级间的跃迁. 由于分子的振动能级之间的差较大，其能级跃迁所对应的振-转拉曼光谱线离瑞利线较远，它由一条较强的和两侧对称分布且密集等距的较弱的散射线组成，较强的散射线与入射光谱线的频率差等于分子振动光谱的中心谱线的频率，相邻散射线之间的波数差为 $4B$. 通常由于在较高的振动能级上分子布居数要小得多，因此在常温下，反斯托克斯线不出现. 分子振-转拉曼光谱提供了分子键合强度和分子键长等信息.

只有异核双原子分子才存在分子的纯转动光谱和振动光谱，同核双原子分子不存在分子的纯转动光谱和振动光谱. 但在两类分子中都存在拉曼光谱，拉曼光谱几乎成为获得同核双原子分子结构数据的惟一手段.

例题 2.9.5　当波长为 6328 Å 的激光入射到 HCl 分子样品上时，在散射光中出现 5321 Å 和 7805 Å 两种波长的谱线. 这两条谱线来自振动跃迁的拉曼散射，并满足选择定则 $\Delta v=\pm 1$. 如果不考虑非简谐振动的影响，则 HCl 分子振动的频率是多大？

解　题给的入射光和散射光的波长值和相应的波数为

$$\lambda_0=6382\ \text{Å}, \quad \tilde{\nu}_0=15\ 803\ \text{cm}^{-1};$$
$$\lambda_1=5321\ \text{Å}, \quad \tilde{\nu}_1=18\ 793\ \text{cm}^{-1};$$
$$\lambda_2=7805\ \text{Å}, \quad \tilde{\nu}_2=12\ 812\ \text{cm}^{-1}.$$

由于 $\tilde{\nu}_1,\tilde{\nu}_2$ 来自振动跃迁，它们与入射光谱线的波数差等于振动波数：

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_1 - \tilde{\nu}_0 = \tilde{\nu}_0 - \tilde{\nu}_2 = 2990\ \text{cm}^{-1},$$

则 HCl 分子振动的频率为 $\nu=\tilde{\nu}c=8.97\times10^{13}$ Hz.

第三章　原子核物理

3.1　原子核的基本性质

3.1.1　原子核的组成和稳定性

原子核的组成

1919年卢瑟福用α粒子轰击$^{14}_{7}N$产生了$^{17}_{8}O$和氢核，他认为氢核曾经是氮核的组成部分，因此将氢核命名为质子(proton). 在中子发现之前，人们知道的"基本"粒子(实物粒子)只有两种：电子和质子. 又发现原子核(nucleus)能够自发地放出由电子组成的β射线. 因而很自然地认为核是由A个质子和$A-Z$个电子组成的. 但仔细考虑就发现与量子理论有矛盾. 首先从统计性分析，$^{14}_{7}N$原子核如果看作由14个质子和7个电子组成，由于质子和电子都是费米子，由21个费米子组成的体系也应该是费米子，但实验证实$^{14}_{7}N$原子核是玻色子，自旋为$\hbar$. 这就是历史上"氮的灾难". 另一个问题是，由不确定关系可知，要将电子束缚在原子核内，电子的能量约为10^8 eV，在原子核β衰变中观测到的电子能量为10^6 eV. 两者悬殊太大.

1920年卢瑟福[①]在一次演讲中提出"在某些情况下，也许有可能由一个电子更加紧密地与氢核结合在一起，组成一种中性双子. "他断言"要解释重元素的组成，这种原子(指质子与电子紧密结合的中性"双子")的存在看来几乎是必要的". 在他的演讲数月后，他邀请查德维克(J. Chadwick)共同研究氮原子核组成问题. 直到1930年博思(W. Bothe)和他的学生贝克尔(H. Becker)利用钋发射的α粒子轰击铍等轻元素，发现一种穿透力很强的中性射线，能穿透铅板被计数管记录下来. 他们断言是γ射线，发表了这一结果. 当时在巴黎的

① E. Rutherford, *Proc. Roy. Soc.*, **A97** (1920)374.

居里夫妇也正在进行类似的实验①，他们用 α 粒子轰击铍靶，再用放出的穿透性很强的射线轰击石蜡，结果从石蜡中飞出的反冲质子，最大能量为 5.7 MeV. 可惜的是和博思一样，他们也错误地将从铍靶发出的辐射看成是 γ 射线. 当查德维克读到居里夫妇的论文后，立刻意识到反冲质子不可能被 γ 射线打出. 因为光子没有静质量，如果要打出质子，光子应有 50 MeV 以上的能量. 查德维克立即重做实验，用此穿透性很强的不带电的辐射通过氢和氮靶，分别测出氢核和氮核的反冲速度，利用能量和动量守恒很容易算出入射粒子的质量：

$$\frac{v_H}{v_N}=\frac{m_n+m_N}{m_n+m_p}, \tag{3.1.1}$$

其中 v_H，v_N 分别为反冲氢核和氮核的速度；m_n 为中子的质量，m_p 和 m_N 分别为氢核和氮核的质量. 从而测定了中子的质量. 1932 年 2 月 17 日，查德维克在来不及发表实验结果的情况下，致信给 Nature 杂志编辑部，题为“Possible Existence of the Neutron”，这就是中子(neutron)的“出生证”②. 他因此获 1935 年诺贝尔物理学奖. 从中子发现的过程看，科学工作者不仅要有不畏艰苦、认真踏实的精神，更需要破除传统观念、敢于提出新思想的勇气. 伊瓦宁科(D. Iwanenko)③、和海森伯④等人随即提出了原子核由质子和中子组成，解决了上述矛盾，从而被人们普遍接受. 精确测量发现，自由中子和质子的质量相差甚微，他们分别为

$$m_n=1.008\,665\ \mathrm{u},\quad m_p=1.007\,277\ \mathrm{u}, \tag{3.1.2}$$

其中原子质量单位 u＝1.660 540 2×10^{-27} kg(碳单位)，1u · c^2＝931.5 MeV. 中子和质子除有微小质量差及电荷差别外其余性质十分相似，海森伯统称它们为核子(nucleon). 并将中子和质子看作核子具有不同同位旋(isotopic spin 或 isobaric spin 或 isospin)的两个状态，后来知道，存在在原子核内的中子可以是稳定的，而自由中子是不稳定的，它的寿命为 888.6 s，约为 15 min.

---

① I. Curie and F. Foliot, *Compt. Rend. Acad. Sci.*, Paris, **194** (1932) 428.

② J. Chadwick, *Nature*, **129** (1932) 312; *Proc. Roy. Soc.* **A136** (1932) 692.

③ D. Iwanenko, *Nature*, **129** (1932) 795; *Compt. Rend. Acad. Sci.*, Paris, **195** (1932) 439.

④ W. Heisenberg, *Zeits. für Phys.*, **77** (1932) 1; **78** (1932) 156; **80** (1933) 587.

原子核的质量和核素

当用原子质量单位 u 去量度各原子核的质量时，发现它们都近似为一整数，该整数称为核的质量数，就是核内质子数 Z 和中子数 N 之和，用核子数 A 表示，和核电荷数(即核内质子数)Z 一起成为区分不同原子核的最重要的标志，需要注意的是，质量数 A 既不同于核的实际质量，又不同于元素的原子量，它是一个无量纲的整数.

具有相同质子数 Z 和中子数 N 的一类原子核称为核素(nuclide). 核素用符号${}_Z^AX_N$ 表示，如${}_1^1H_0$，${}_2^4He_2$. 实际上常常简写为${}^AX$ 或${}_Z^AX$. Z 相同 N 不同的核素称为同一种元素的同位素(isotope)；N 相同 Z 不同的核素称为同中子异荷素；A 相同 Z 不同的核素称为同量异位素.

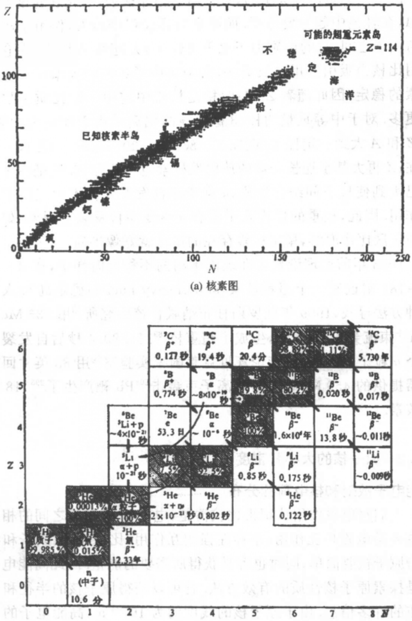
核素图和原子核的稳定性

图 3.1.1(a) 为核素图. 以 N 为横坐标，Z 为纵坐标，每个核素在图上占据一个方格，每个方格内标上核素符号、衰变类型、半衰期和丰度. (b) 为部分核素图. 如果将稳定核素的方格涂黑，可以看到它们集中在一条狭长的区域内. 轻核中的中子数与质子数近似相等. 随着核子数的增加，中子数比质子数越来越多，重核中的中子数与质子数之比约为 3 : 2. 通常用一条曲线表示稳定核区域中心的位置，近似地有下述经验关系：

$$Z = \frac{A}{1.98 + 0.0155A^{2/3}}, \tag{3.1.3}$$

此曲线称为 β 稳定线. 在它的上下两侧由两条曲线所包围的区域中的核是不稳定的，离 β 稳定线越远，稳定性越差，不稳定核区域以外不存在原子核.

不稳定核都具有放射性. β 稳定线右下边的核具有 β^- 放射性，其下边沿称为中子溢出线，在这条线上的丰中子核的中子数已填满，再加上的中子都会溢出来；β 稳定线左上边的核具有 α 放射性或 β^+ 放射性，其上边沿称为质子饱和线，在这条线上的丰质子核的质子数已饱和，不可能再增加. β 稳定线表明，原子核中的核子有中子、质子对称相处的趋势，在轻核中最明显. 中子和质子都是费米子，泡利原理要求每个能态只能存在自旋相反的两个中子和两个质子，质子和中



(a) 核素图

(b) 部分核素图

图 3.1.1

子是核子的两种不同的同位旋状态，在质子数较小时，具有近似相同的单粒子能态，因此 $N=Z$ 时，体系能量最低.

由于核力是短程吸引力，只作用于相邻核子，因此总的核力正比于 A，在轻核中起主要作用. 而库仑力是长程排斥力，作用于所有质子与质子之间，总的电磁力正比于 $Z(Z-1)$. 随着 A 增大，库仑排斥作用比核力吸引作用增长更快，必须靠中子数的较大增长才能保持核素的稳定，因此随着 Z 增加，稳定核素中的中子数比质子数增加得更多. 对于中等重量的核，β 稳定线的偏离是由于库仑力的影响. 当 Z 和 A 大到一定程度(例如 $Z>83$，$A>209$)之后，稳定核素不再存在；Z 再大甚至连长寿命的放射性核素也不能存在. 这是由于库仑力已大到使核子间结合较松，α 衰变和自发裂变等不稳定因素逐渐起作用. 因此，很重的核素几乎都有 α 衰变和自发裂变现象. 如果把不稳定区比作海洋，稳定核素存在的区域就好像半岛.

1966 年前后理论预言在远离半岛的不稳定海洋中，在 $Z\sim114$，$N\sim184$ 附近有一个超重核素(superheavy nuclei)稳定岛①. 人们用各种方法寻找，1999 年俄罗斯杜布纳联合核研究所②用 236 MeV 的 $^{48}Ca^{5+}$ 束流轰击 ^{244}Pu 靶，生成了超重核 $^{289}114$. 30.4 秒后自发裂变出一个 α 粒子. 美国加州劳伦茨贝克莱国家实验室③用 88 英寸回旋加速器提供的 459 MeV $^{86}Kr^{19+}$ 离子束轰击 ^{208}Pb 靶产生了 $^{293}118$ 的超重核素.

3.1.2 原子核的大小和密度

高能电子散射和核电荷的分布

人们对电磁作用认识得比较清楚，电子、μ 子与核之间的相互作用主要是电磁相互作用，不存在强相互作用，比 α 粒子、质子和中子轰击原子核要简单，同时也容易获得所需要的能量. 因此高能电子散射是探索原子核性质的有效方法. 它可以获得原子核的半径和电荷分布的许多信息. 由于原子核的线度约为 10^{-14} m，高能电子的德布罗意波长 $\lambda\!\!\!^{-}=\hbar/p$ 必须小于这个线度，才能探测到原子核内部的细

---

① C. E. Bemis, J. R. Nix, *Comments Nucl. Part. Phys.*, **7** (1977) 65.

② V. Ninov *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999) 1104; Yu. Ts. Oganession *et al.*, *Nature* **400** (1999) 242.

③ 张焕乔，原子核物理评论，**16** (1999) 192.

节. 比如, 1 GeV 的电子其$\lambda \approx 1.97 \times 10^{-16}$ m. 由理论分析可知, 高能电子对具有一定电荷密度分布 $\rho(\boldsymbol{r})$的原子核的微分散射截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Ru} |F(\boldsymbol{q})|^2, \tag{3.1.4}$$

其中 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$是电子经过原子核散射后波矢的改变, $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Ru}$为卢瑟福微分散射截面. $F(\boldsymbol{q})$称为原子核的电荷形状因子:

$$F(\boldsymbol{q}) = \int e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \rho(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}, \tag{3.1.5}$$

它是原子核电荷密度分布 $\rho(\boldsymbol{r})$的傅里叶变换. 由傅里叶反变换可得原子核的电荷分布

$$\rho_c(\boldsymbol{r}) = Ze\rho(\boldsymbol{r}) = \frac{Ze}{(2\pi)^3}\int e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} F(\boldsymbol{q}) d\boldsymbol{q}, \tag{3.1.6}$$

由此, 可以通过测量高能电子微分散射截面测定原子核的电荷分布. 用电子散射研究核结构的方法是由霍夫斯塔特(R. Hofstadter)及其合作者开创的①. 电子加速器产生能量为 250 MeV 到几个 GeV 的强电子束, 打在靶核上, 弹性散射电子的强度作为散射角的函数被测定. 实验表明, 电荷分布可近似用二参量费米分布函数描述:

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left(\frac{r-c}{a}\right)}, \tag{3.1.7}$$

其中 ρ_0 为常数, c 和 a 是两个参量, c 是半密度半径, 即 $\rho(c)=\rho_0/2$; a 是表示核边界弥散程度的参量. 一般情况 c 比 a 大得多, 所以在核的中心部分, 电荷密度接近常数. 如果定义电荷密度从 0.9 ρ_0 下降到 0.1 ρ_0 的距离为边界厚度 t, 则由上式可得

$$t = (4\ln 3)a = 4.4a. \tag{3.1.8}$$

因此边界厚度和 a 成正比. 对不同的核 a 近似为常数.

原子核半径

氢原子的波函数表明, 电子分布的边界不十分明确. 原子核相对来说有比较明确的边界. 在原子核表面以内, 原子核物质存在的几率很高; 在原子核表面以外, 这个几率很快下降为零. 特别是重原子核

① R. Hofstadter, H. R. Fechter and J. A. McIntyre, *Phys. Rev.* **92** (1953) 978.

更是这样. 实验研究表明,一部分原子核的形状接近球形. 其余的核为椭圆形,它们主要集中在核子数 $A\sim150-190$ 和 $A>220$ 的区域. 不过它们绝大部分相对球形的变形是较小的. 因此,可以用"半径"R 来近似地描述核的大小. 核半径的含义有两种,一是核电荷(即质子)分布范围,二是核力作用范围,由于核力作用于所有核子之间,核力的作用范围实质上就是核物质的分布范围. 两种含义对应着两种不同的测量方法.

从核电荷分布范围看,原子核半径可分为:

(1) 均方根(rms)半径 $\langle r^2\rangle^{1/2}$,

$$\langle r^2\rangle^{1/2}=\left[\frac{\int r^2\rho(r)\mathrm{d}\tau}{\int\rho(r)\mathrm{d}\tau}\right]^{1/2}, \tag{3.1.9}$$

其中 $\rho(r)$是核电荷(或核物质)的密度. 核电荷密度即质子的分布密度;核物质密度为核子的分布密度.

(2) 等效均匀半径 R: 假设 $\rho(r)$均匀分布在半径为 R 的球形核内,则

$$\langle r^2\rangle^{1/2}=\left[\frac{\int_0^R 4\pi r^4\mathrm{d}r}{\int_0^R 4\pi r^2\mathrm{d}r}\right]^{1/2}=\sqrt{\frac{3}{5}}R, \tag{3.1.10}$$

$$R=\sqrt{\frac{5}{3}}\langle r^2\rangle^{1/2}, \tag{3.1.11}$$

大量实验指出$\langle r^2\rangle^{1/2}$和等效均匀半径 R 近似与 $A^{1/3}$成正比:

$$R=r_0A^{1/3},\quad r_0\sim1.2\ \mathrm{fm}. \tag{3.1.12}$$

从核力作用范围看,利用微观粒子和核的核力作用,如利用高能核子,π 介子等参与强相互作用的粒子与核的散射,可测出核力作用半径. 在此半径之内有核力作用,半径之外无核力作用. 核力是作用于核子之间的短程力,核力作用半径大致反映了核物质分布半径,实验证明核力作用半径 R 与 A 也有类似的关系:

$$R=r_0A^{1/3},\quad r_0\sim1.4-1.5\ \mathrm{fm}. \tag{3.1.13}$$

可见,核力作用范围要比核电荷分布半径偏大些. 表明在核的表面区

域中子比质子多一些，相当于原子核有一层中子皮.

核物质密度

两种测量方法都得出 $R \propto A^{1/3}$，可知核体积 V 与核子数 A 成正比.

例题 3.1.1　求组成全部原子核的核物质的近似密度.

解　假设原子核的体积为一半径为 R 的均匀球体的体积，

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi(Ar_0^3),$$

取 $r_0 = 1.20\ \mathrm{fm}$，所有原子核内的核子数密度

$$n = \frac{A}{\frac{4}{3}\pi R^3} = \frac{3}{4\pi r_0^3} = 0.14\ \mathrm{nucleons/fm^3}.$$

每个核子的质量为 $\mathrm{u} = 1.7 \times 10^{-27}\ \mathrm{kg}$，核物质密度 ρ_m 近似为

$$\rho_m = n\mathrm{u} = 2.4 \times 10^{17}\ \mathrm{kg/m^3}.$$

核物质密度约是水的密度的 10^{14} 倍，每立方厘米的核物质的质量约为 2.3 亿吨，是一种高密物质. 一些晚期恒星，在它们核心中的氢作为热核聚变能源耗尽之后，星体的巨大质量引起的万有引力可将自身压缩成密度极大的天体，这个过程就是引力坍缩，或者超新星爆发. 在这种情况下原子已破坏，电子离开核而形成电子海洋，核沉浸在电子海洋中，称为白矮星，密度约 $10^9 \sim 10^{11}\ \mathrm{kg/m^3}$. 质量更大的晚期恒星的引力甚至可将电子压入核内，与核内质子形成中子，整个星体主要由中子组成，称为中子星. 典型的中子星的质量为太阳的两倍，半径仅为 10 公里，密度达 $10^{17} \sim 10^{18}\ \mathrm{kg/m^3}$，已经是核密度量级.

3.1.3　原子核的自旋和宇称

核自旋

原子核的自旋，或它的自旋角动量，是核的重要性质之一；核磁矩是指核的磁偶极矩，它与核自旋有密切关系. 原子核之所以具有自旋角动量，是因为组成原子核的质子和中子都是自旋为 1/2 的粒子，都有自旋角动量；而且核子在核内又有复杂的相对运动，产生相应的轨道角动量. 所以，核自旋应是核内所有核子的自旋角动量和轨道角

动量的矢量和. 乍看起来，要找出一个核(哪怕是较简单的核)的自旋是很困难的，其实下面我们将看到，它有非常简单的规律可循. 根据量子力学，核自旋的大小是量子化的，可表示为

$$|\boldsymbol{I}| = \sqrt{I(I+1)}\,\hbar, \tag{3.1.14}$$

I 称为核自旋量子数. 核自旋是个矢量，它也具有空间量子化的特性，在空间某特定方向 (z 轴) 的投影为

$$I_z = m_I \hbar, \quad m_I = I, I-1, \cdots, -I, \tag{3.1.15}$$

m_I 称为自旋磁量子数，可取 $2I+1$ 个值. 习惯上，又常常用 I (即以 $\hbar$ 为单位的最大投影值)来表示核自旋，一般数据表中给出的核自旋就是 I 值. 若要准确表达，则应将 I 代入 (3.1.14) 式求 $|\boldsymbol{I}|$.

核自旋值可由实验测定. 比较分析各种核素的核自旋数据，可得出下述规律：

对于偶偶核(Z 和 N 都为偶数)，I 均为零；

对于奇 A 核(偶 Z 奇 N 或相反)，I 均为半整数；

对于奇奇核(Z 和 N 都为奇数)，I 均为整数.

由于核子都是费米子，而轨道角动量量子数都是整数，因此奇 A 核是费米子，偶 A 核为玻色子. 对于这些规律，在讨论核结构的壳层模型时会给出一定解释. 这里需要说明的是，这些规律曾是核的质子-中子构成说的重要实验依据之一. 按质子-电子说，核内有 $2A-Z$ 个粒子 (它们都是自旋为 1/2 的费米子)，核自旋是整数或半整数应取决于 Z 的值是偶数或奇数. 如 $^{14}_{7}N$ 的 I 应为半整数(因 $Z=7$ 是奇数)，但实验发现其 $I=1$，这就是历史上著名的"氮的灾难"，而质子-中子说则很好地解决了这一困难.

应该指出，一般书刊上给出的数据都是基态时的核自旋，激发态的自旋往往与基态的不同. 由于重离子加速器和探测技术的发展，人们已经深入研究自旋很大 ($I>100$) 的原子核的激发态，称为高自旋态. 这些高自旋态具有一些奇特的性质，研究这些特性，是核物理的一个新的领域，对核结构的研究有重要意义.

核磁矩

质子的磁矩为

$$\mu_p = \frac{e\hbar}{2m_p}(g_{pl}\boldsymbol{L} + g_{ps}\boldsymbol{S}), \tag{3.1.16}$$

定义:

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 3.152 \times 10^{-8}\,\mathrm{eV/T} \tag{3.1.17}$$

为核的玻尔磁子,电子的玻尔磁子是它的 1836 倍.

在 20 世纪 30 年代,物理学家认为质子和电子一样是自旋为 1/2 的费米子,它们都可以看成是点电荷.不同的只是质量的大小和电荷的正负.当斯特恩(O. Stern)快要结束对质子磁矩测量时,向一些理论物理学家询问质子和中子的自旋 g_s 因子值,包括玻恩在内的理论物理学家都一致回答 $g_{ps}=2$,$g_{ns}=0$,因为这是狄拉克理论所要求的.但是两个月后,斯特恩给出的实验结果为 $g_{ps}=5.6$,$g_{ns}=-3.82$.精确的实验给出质子 $g_{pl}=1$,$g_{ps}=5.58$;对于中子 $g_{nl}=0$.因此 $\mu_p=2.792\,85\mu_N$,这同电子磁矩$\approx 1\mu_B$ 有明显差别,已不等于 $1\mu_N$;中子不带电,但并非"磁矩当然为零",与轨道角动量相联系的磁矩为零,与自旋角动量相联系的磁矩不为零,而是 $\mu_n=-1.913\,04\mu_N$.这说明质子和中子都不是几何的"点",而是具有内部结构的粒子.就是说,中子从整体看不带电,但有内部结构 (带有不同电荷),又有角动量,所以产生磁矩.质子也一样,从整体看带电荷$+e$,但因有内部结构,又有角动量,所产生的磁矩可以不等于 1 个核磁子.质子和中子内部电荷分布如图 3.1.2 所示.斯特恩由于测定了测定质子磁矩获得了 1943 年诺贝尔物理学奖.

核磁矩来自两个方面,一是与核内各核子的自旋运动相联系的自旋磁矩(亦称本征磁矩或固有磁矩);二是与核内各核子的轨道运动相联系的轨道磁矩.同核外电子类似,核磁矩同核自旋的关系可表示为

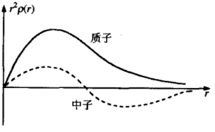


图 3.1.2 质子和中子内部电荷分布

$$\mu_I = g_I \frac{e}{2m_p}|\boldsymbol{I}| = g_I\sqrt{I(I+1)}\,\mu_N, \tag{3.1.18}$$

g_I 称为原子核的 g 因子（又称回转磁比率），注意到核子包括质子和中子，g_I 的计算比较复杂. 它的数值通常由实验测定（其数值有正有负）. 实验结果表明，核磁矩值并不等于各核子磁矩的简单相加. 核磁矩在空间某一特定方向（Z 轴）上的投影为

$$\mu_{I_z} = g_I \frac{e}{2m_p} I_z, \tag{3.1.19}$$

式中的 $I_z = m_I \hbar$，$m_I = I, I-1, \cdots, -I$. 需要强调的是：习惯上用投影 μ_{I_z} 的最大值

$$\mu_I' = g_I I \mu_N \tag{3.1.20}$$

来表示核磁矩的大小. 一般书刊上给出的核磁矩 μ 值，实际上就是这个最大投影值 μ_I'. 如果知道 I，测出 g_I，就可知道核磁矩值 μ. 所有 $I=0$ 的核，其磁矩 $\mu=0$；所有 $I\neq 0$ 的核，其 $\mu\neq 0$. 核磁矩 μ 值在 -2 和 $+6$ 之间变化，负号表示磁矩与自旋方向相反，正号则表示方向相同. 氘核（${}^2_1\mathrm{H}$）磁矩 $\mu_D = 0.857\mu_N$，和 $\mu_p + \mu_n = 0.880\mu_N$ 不等. 这说明核的磁矩不等于各自由核子磁矩的简单相加，即不仅是自旋磁矩有贡献，还有轨道运动磁矩的贡献.

核的宇称

原子核波函数可以近似地看作诸核子波函数的乘积，因此原子核的宇称为诸核子轨道宇称和内禀宇称之积：

$$\pi_N = \prod_{i=1}^{A} (-1)^{l_i} \prod_{i=1}^{A} \pi_i, \tag{3.1.21}$$

由于核子的内禀宇称为正，所以所有核子的轨道角动量之和决定原子核的宇称.

核的电四极矩

设原子核的电荷分布为 $\rho(\boldsymbol{r}')$，在 $\boldsymbol{r}$ 处所产生的电势为

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V \frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\boldsymbol{r}', \tag{3.1.22}$$

若以勒让德级数进行多级展开，当 $\boldsymbol{r}\gg\boldsymbol{r}'$ 时，有

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r'^l}{r^{l+1}} \mathrm{P}_l(\cos\theta), \tag{3.1.23}$$

θ 为 $\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{r}'$ 的夹角. 代入(3.1.22)有：

$$\varphi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{r^{l+1}}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')r'^{l}\mathrm{P}_l(\cos\theta)\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

$$=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left\{\frac{1}{r}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'+\frac{1}{r^2}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')r'\cos\theta\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\right.$$

$$\left.+\frac{1}{2r^3}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')r'^2(3\cos^2\theta-1)\mathrm{d}\boldsymbol{r}'+\cdots\right\},\tag{3.1.24}$$

其中第一项为

$$\varphi_0(\boldsymbol{r})=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze}{r}.\tag{3.1.25}$$

这相当于将原子核看成是应该带有 Ze 的点电荷所产生的电势. 第二项是电偶极矩产生的电势. 原子核的电荷分布在 $\boldsymbol{r}'\to-\boldsymbol{r}'$ 的变换中保持不变,即 $\rho(-\boldsymbol{r}')=\rho(\boldsymbol{r}')$. 这样电偶极矩产生的电势为零,即

$$\varphi_1(\boldsymbol{r})=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r^2}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')r'\cos\theta\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

$$=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r^2}\int_V\rho(-\boldsymbol{r}')r'\cos(\pi-\theta)\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

$$=0.\tag{3.1.26}$$

实验证实了原子核没有电偶极矩. 第三项是电四极矩产生的电势

$$\varphi_1(\boldsymbol{r})=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2r^3}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')r'^2(3\cos^2\theta-1)\mathrm{d}\boldsymbol{r}'=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e}{2r^3}Q,\tag{3.1.27}$$

其中电四极矩 Q 定义为

$$Q=\frac{1}{e}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')r'^2(3\cos^2\theta-1)\mathrm{d}\boldsymbol{r}'.\tag{3.1.28}$$

电四极矩具有面积的量纲,单位是靶恩: $1\mathrm{b}=10^{-24}\,\mathrm{cm}^2$. 假如原子核是一旋转椭球,对称轴的长半轴为 c,短半轴为 a,并且假定核电荷均匀分布,可以证明:

$$Q=\frac{2}{5}Z(c^2-a^2).\tag{3.1.29}$$

显然,球形核的电四极矩为零.

习　题

3.1.1　证明,在查德维克的实验中,在弹性碰撞下,利用能量、动量守恒,可以得到:$\frac{v_H}{v_N}=\frac{m_n+m_N}{m_n+m_p}$.

3.1.2　假设太阳若干年变成中子星后质量保持不变,计算那时的太阳半径.太阳的质量为 1.99×10^{30} kg.目前太阳的平均半径为 6.96×10^{8} m.

3.1.3　用核电荷分布的二参数费米分布函数(3.1.7),证明核电荷密度从 $0.9\,\rho_0$ 下降到 $0.1\,\rho_0$ 的距离为

$$t=(4\ln3)a=4.4a.$$

3.1.4　用电子散射方法测得某原子核的半径为 3.6 fm,取 $r_0\sim1.2$ fm,试确定该原子核的质量数.

3.1.5　基态^{7}Li 原子核的自旋和磁矩为 3/2 和 $+3.26\mu_N$,将一自由的^{7}Li 原子核置于 2.16 T 的磁场中.(1) 因为空间量子化,其基态将分裂为几个能级?(2) 相邻能级之间的能量差是多少?(3) 相邻能级之间跃迁产生光子的波长是多少?(4) 处于电磁波谱的哪个区域?

3.2　原子核的核力和结合能

3.2.1　核力

核力的一般性质

万有引力在原子核内可以忽略,电磁力使核内质子相互排斥.能使核子紧密结合在一起形成密度高达 10^{14} g/cm^3 的原子核的作用力是核力.多年来经过实验和理论的研究、分析,对核力已有所了解.目前较肯定的有下列一些重要性质.

(1) 核力是强相互作用的吸引力:质子之间的库仑排斥力反比于距离的平方,原子核内质子之间的距离非常短,但质子竟然紧密结合不散开,充分说明核力是强相互作用的吸引力.强度约为库仑力的 100 倍.

(2) 核力的短程性和饱和性:核力的力程约为 fm 量级.由核的结合能大致与核子数 A 成正比,而不是与 A^2 成正比,说明核内每个

核子只和它周围的几个核子发生作用而不是和其余所有核子发生作用，这就是核力的饱和性. 与液体分子性质类似.

(3) 核力与电荷无关：1936 年前后，贝特(H. A. Bethe)及其合作者在连续的三篇论文，即所谓“贝特圣经”[①]中，评述了当时的研究状况，核力的关键特征才暴露出来. 有特殊启示性的是 pp 和 np 散射的数据分析：减去 pp 散射的库仑效应后，发现 pp 和 np 的强相互作用力有大致相等的强度和大致相同的力程[②]. 菲因伯格(E. Feenberg)和维格纳(E. P. Wigner)也找到了核力与电荷无关性的有力证据[③]. 核力的电荷无关性简述如下：不计电磁效应，处于相同状态的任意两个核子间的作用力相同. 以 ^{3}H 和 ^{3}He 核的结合能为例可以说明核力与电荷无关. ^{3}H由一个质子和两个中子组成，其中包含两对 n-p 核力相互作用和一对 n-n 核力相互作用；^{3}He 由两个质子和一个中子组成，其中包含两对 n-p 核力相互作用和一对 p-p 核力相互作用. 实验测得这两个核的结合能分别为

$$E_B(^3\mathrm{H}) = 8.48\ \mathrm{MeV}; \quad E_B(^3\mathrm{He}) = 7.72\ \mathrm{MeV},$$

^{3}He 核的结合能比 ^{3}H 核的结合能小，其原因是由于 ^{3}He 核中多了一对质子之间的库仑斥力能. 如果设两个质子之间的距离为 2 fm，则两个质子之间库仑斥力能约为 0.72 MeV. 因此在 ^{3}He 核中没有库仑斥力能只有核力作用的情况下，其结合能为 8.44 MeV. 与 ^{3}H 核的结合能相近，因此可以认为 n-n 和 p-p 之间的核力相互作用是相同的. 后来知道，不仅核子之间，而且所有强子之间的作用力都是与电荷无关的[④].

核力与电荷无关性导致了一个新的守恒量子数——同位旋的引入. 1932 年海森伯[⑤]建议把中子和质子看成是一种粒子（核子）的两种不同电荷态，中子不带电，质子带电，引进一个抽象的同位旋空间，赋予核子以同位旋 $t=1/2$，并把质子和中子看成具有不同的同位旋

---

① H. A. Bethe, *Rev. Modern Phys.* **8** (1936) 82; **9** (1937) 69; and **9** (1937) 245.

② G. Breit, E. U. Condon and R. D. Present, *Phys. Rev.* **50** (1936) 825.

③ E. Feenberg and E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **51** (1937) 95.

④ E. M. Henley in *Isospin in Nuclear Physics* (D. H. Wilkinson, ed.), North-Holland, Amsterdam, 1969.

⑤ W. Heisenberg, *Z. Physik*, **77** (1932) 1.

第三分量. 如图 3.2.1 所示.

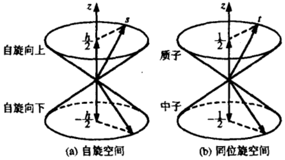


图 3.2.1　质子和中子的自旋和同位旋

习惯上取 $t_3=1/2$ 表示质子态, $t_3=-1/2$ 表示中子态. 质量数为 A 的原子核含有 A 个核子, 总同位旋 $\boldsymbol{T}$ 和第三分量 T_3 分别为:

$$\boldsymbol{T}=\sum_{i=1}^{A}\boldsymbol{t}_i,\quad T_3=\sum_{i=1}^{A}t_{3i}. \tag{3.2.1}$$

根据 t_3 的定义, 可得:

$$T_3=\frac{1}{2}(Z-N)=Z-\frac{A}{2}. \tag{3.2.2}$$

随着粒子物理的发展, 一些新粒子的不断发现, π 介子 ($\pi^{\pm}$, π^0), K 介子 (K^+, K^0) 和超子等强相互作用的粒子都具有同位旋, 在它们参与的强相互作用中, 同位旋守恒 (反应前后, 体系的总同位旋及其第三分量保持不变) 具有普遍意义.

(4) 非中心力成分: 氘核中核力的主要成分是中心力, 但是氘核的电四极矩不等于零, 说明氘核电荷分布不完全是球对称, 即氘核不是纯 S 态, 而混有少量的 D 态, 由于 S 态占的比例很大, 所以核力以中心力为主, 混有少量的非中心力. 一般中心力用核势 $V(r)$ 表示, 只和两个核子间的距离相关, 常用的形式如下:

方势阱:

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r\leqslant r_0,\\ 0, & r>r_0.\end{cases} \tag{3.2.3}$$

高斯势:

$$V(r)=-V_0\exp(-r^2/r_N^2), \tag{3.2.4}$$

指数势：

$$V(r) = -V_0\exp(-r/r_N), \qquad (3.2.5)$$

汤川势：

$$V(r) = -\frac{V_0\exp(-r/r_N)}{(r/r_N)}. \qquad (3.2.6)$$

非中心力与 $\boldsymbol{r}$ 方向有关，在两个核子的情况下，用核子自旋方向作为参考方向，一般非中心力的形式为中心势乘以一个与 $\boldsymbol{r}$ 方向有关的量 S_{12}：

$$V_t = V(r)S_{12} = V(r)[6(\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})^2 - 2\boldsymbol{S}^2], \qquad (3.2.7)$$

其中 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$ 是两个核子的自旋之和，$\hat{\boldsymbol{r}}$ 表示 $\boldsymbol{r}$ 方向的单位矢量. 当两个核子自旋反向时 $S_{12}=0$，没有非中心力，只有自旋三重态时才有非中心力.

(5) 核力与自旋相关：实验测得氘核的自旋和宇称为 $I^\pi=I^+$，氘核的自旋 $\boldsymbol{I}$ 为两个核子的总自旋 $\boldsymbol{s}$ 和相对运动轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 之和：

$$\boldsymbol{I} = \boldsymbol{s} + \boldsymbol{l}, \qquad (3.2.8)$$

$$\boldsymbol{s} = \boldsymbol{s}_n + \boldsymbol{s}_p, \qquad (3.2.9)$$

由于 $s_n=s_p=1/2$，总自旋 $s=0$ 或 1. 氘核是由两个核子组成的，其轨道角动量由一个核子相对于另一个核子的运动决定，而不是两个核子的轨道角动量之和. 因此总角动量 I 为 1 的态可能有 $^1P_1$，$^3S_1$，$^3P_1$，$^3D_1$，这里采用了类似原子态的符号. 由于原子核有一定的宇称，氘核基态的可能状态为 $^3S_1+{}^3D_1$ 的混合，即只能由 $s=1$ 自旋三重态组成. 表明核力与两核子的自旋相对取向有关，在自旋单态和自旋三态中核力是不相同的. 核力作用将使中子和质子倾向处于自旋平行的态.

(6) 自旋-轨道耦合力成分：自旋向上和自旋向下的核子数目不等，如果核子的自旋全部向上或全部向下，则称为完全极化，如果不是全部，则称为部分极化. 纯中心势场与自旋无关，不会引起极化. 非中心力成分与自旋取向有关，可以引起极化. 但计算表明，仅非中心力是不能给出与实验相符的极化度的. 只有引入自旋-轨道耦合力才能解释实验结果，其形式为

$$V_{LS} = V_{LS}(r)\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}. \qquad (3.2.10)$$

因此自旋单态没有自旋-轨道耦合力，自旋三重态中有自旋-轨道耦合力.

(7) 核力中存在排斥芯：实验表明，特别是高能的核子-核子散射实验指出，当核子之间的距离极小(约为零点几费米)时，核力成为很强的排斥力. 这个排斥芯阻止核子间进一步接近，从而保证原子核有一定的体积，而不致于“坍缩”.

核力的介子理论

1935 年，日本物理学家汤川秀树(H. Yukawa)把核力和电磁力类比，提出核力的介子理论. 他认为核力也是一种交换力，核子间通过交换某种媒介粒子而发生相互作用；并根据核力的力程估算了媒介粒子的质量. 考虑核力的作用范围约为 2 fm，可以算出媒介粒子的质量约为 100 MeV/c^2，约为电子静止质量的 200 倍. 它介于质子质量和电子质量之间，故被命名为介子. 实验物理学家于 1936 年找到了 μ 子，其质量为电子质量的 207 倍，但很快发现它与核子作用很弱，不参与强相互作用，不可能是汤川秀树所预告的介子. 直到 1947 年才真正找到了参与强相互作用的 π 介子($\pi^{\pm}$，π^0). 它们的质量分别是电子质量的 273.3、273.3 和 264 倍.

核力的夸克模型

核力的汤川介子场论在核力的长程范围内取得很大成功，但是在核力的短程范围内会出现严重的困难. 这是因为两个核子相距很近，甚至重叠时，核子内部夸克结构的影响就不可忽略. 核力的夸克模型认为核力本质上来源于夸克所带色荷之间的色相互作用. 而夸克之间相互作用的传播子是胶子. 夸克和胶子才是构成原子核的基本粒子.

3.2.2 结合能

质量和结合能

实验发现，原子核的静质量总比组成该原子核的各核子静质量之和要小，或者说，当由自由的静止核子结合成一个原子核时，其质量会有所减小，两者之差

$$\Delta m(Z,A) = Zm_p + (A-Z)m_n - m_N(Z,A) \quad (3.2.11)$$

称为"质量亏损". 这里 m_p、m_n 和 $m_N(Z,A)$ 分别为质子、中子和核 (Z,A) 的质量,与此质量亏损相对应的能量

$$E_B(Z,A) = \Delta m(Z,A)c^2 = [Zm_p + (A-Z)m_n - m_N(Z,A)]c^2 \quad (3.2.12)$$

即为核 (Z,A) 的结合能. 它表示由彼此没有相互作用且处于静止状态下的 Z 个质子和 $(A-Z)$ 个中子结合成原子核 (Z,A) 时所放出的能量,也就是将该原子核分离成彼此独立且处于静止状态的各核子时外界所需提供的能量. 结合能 $E_B(Z,A)$ 与质量数 A 的比值

$$\varepsilon = E_B(Z,A)/A \quad (3.2.13)$$

称核 (Z,A) 的平均结合能(或比结合能),它表示在结合成该核时平均每个核子所释放的能量,或将该核分离成各个独立核子时平均每个核子所需要的能量. 图 3.2.2 显示了原子核的平均结合能作为核子数的函数.

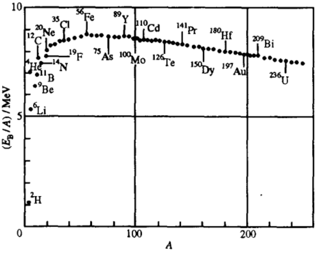


图 3.2.2 原子核的平均结合能

不同核的平均结合能 ε 不同. $A<30$ 的轻核,ε 随 A 的增大而增大,但其中有周期性变化. 在$^4_2$He、$^8_4$Be、$^{16}_8$O、$^{20}_{10}$Ne 和$^{24}_{12}$Mg 等偶偶核处有极大值. 这些核的质量都是 4 的倍数,表明核内可能存在稳定的 4 核子集团,即 α 粒子集团. 实验证实了这一设想. $30<A<150$ 的中等

核，ε 的值较大且随 A 变化不大；$A>150$ 的重核，ε 随 A 的增大呈缓慢下降的趋势，ε 值的大小，反映了核的稳定程度．一般来说，ε 越大核越稳定．原子核最稳定的区域在 $50<A<80$．$A>80$ 的重核分裂成两个中等质量的核和 $A<50$ 的轻核聚合成重核都会使结合能改变，放出核能．原子能就是原子核结合能发生变化时释放的能量．

由于电子和原子核组成原子的结合能一般只有几十电子伏，比每个核子的平均结合能小 5 个量级，忽略原子的"质量亏损"，则仍可认为原子的质量 $M_a(Z,A)$ 等于核的质量与 Z 个电子质量之和，即

$$M_a(Z,A) = m_N(Z,A) + Zm_e. \qquad (3.2.14)$$

在这一近似下，核的结合能表达式可改写为

$$E_B(Z,A) = [ZM_H + (A-Z)m_n - M_a(Z,A)]c^2, \qquad (3.2.15)$$

其中 M_H 为氢原子质量，忽略了 Z 个氢原子的结合能与中性原子 $M_a(Z,A)$ 中 Z 个电子总结合能之差．此式更为常用，因为通常的核素数据表中给出的都是与所讨论的原子核对应的中性原子的质量．质子的原子量就是氢原子的原子量，等于质子的质量加上电子的质量，为 1.007 825 u．1 $uc^2=931.5$ MeV．

结合能并非原子核所特有，一般来说，若干孤立体系由于相互吸引而组合成一个束缚体系时均应放出结合能．例如，由原子核和电子组合成原子时，也有结合能．因此严格地说，中性原子的质量也应小于原子核与 Z 个电子的质量之和，只是这个"质量亏损"比核的要小得多，常常不予考虑．以基态氢原子为例，其结合能为 $E_B=13.6$ eV（也就是电离能），相应的 $\Delta m=E_B/c^2\approx 2.3\times 10^{-32}$ g，它是氢原子质量的 10^{-8}倍．其他原子也有类似情形．而在原子核中，质量亏损最小的氘核，其与氘核本身质量之比亦可达 10^{-3}．不同体系"质量亏损"（因而结合能）的差别如此之大，原因在于组成束缚体系时相互作用力的大小很不同，这个力越大，"质量亏损"或结合能就越大；反之，就越小．组成原子或分子的作用力是电磁力，而组成原子核的力是核力，核力比电磁力强得多．在粒子物理中，由于涉及的作用力更强，因此会出现更大的"质量亏损"．

如上所述，体系的结合能与组成该体系的各组分间的相互作用

有直接关系.因此,原则上应该可以根据相互作用来计算结合能.例如,氢原子的结合能可以根据质子和电子间的库仑作用来计算.彼此远离且静止的质子和电子在库仑作用下逐渐接近而形成束缚体系时所放出的能量就是这个状态下的结合能,它等于此时质子、电子绕其质心的总动能与两者势能之和的负值(设无穷远处势能为零),这是完全可以计算出来的.与此类似,核的结合能也可根据核内核子间的作用力(核力)由全部核子的总动能与它们之间势能之和的负值来表示.但因对核力的了解还不很清楚,故无法直接由此计算结合能.然而,从这个角度来进一步理解结合能这个概念仍然是有益的.

这里所说的结合能,通常都指体系处于基态时的结合能. m_N 和 M_a 是基态时核(或原子)的静质量.当然,体系处于激发态时也有结合能,它等于基态时的结合能减去该态的激发能.例如氢原子 $n=2$ 时结合能为 13.6 eV−10.2 eV=3.4 eV.原子核的情形也一样.

例题 3.2.1 假如将 $^{120}_{50}Sn$ 中所有的质子和中子都拆散,计算所需总能量及每个核子平均所需的能量. $^{120}_{50}Sn$ 的原子量为 119.902 199 u.

解 50个自由质子和70个自由中子的总质量为

$$M = Zm_p + Nm_n = 50 \times 1.007\,825\ \text{u} + 70 \times 1.008\,665\ \text{u} = 120.997\,800\ \text{u},$$

$^{120}_{50}Sn$ 的质量亏损为:

$$\Delta m = 120.997\,780\,0\ \text{u} - 119.902\,219\ \text{u} = 1.095\,601\ \text{u},$$

将 $^{120}_{50}Sn$ 中所有的质子和中子都拆散所需总能量,即结合能为:

$$E_B = \Delta mc^2 = 1.095\,601\ \text{u} \times 931.5\ \text{MeV/u} = 1020.6\ \text{MeV}.$$

每个核子平均所需的能量为 8.50 MeV.

例题 3.2.2 已知稳定核素中 ^{62}Ni 核平均每个核子的结合能最大,其原子量为 61.928 346 u.计算 ^{62}Ni 平均每个核子的结合能.

解 ^{62}Ni 的原子序数为 28,其结合能为

$$E_B = \Delta mc^2 = (28 \times 1.007\,825 + 34 \times 1.008\,665 - 61.928\,346) \times 931.5\ \text{MeV} = 545.267\ \text{MeV}$$

平均每个核子的结合能为 8.795 MeV.

3.2.3 液滴模型(liquid-drop model)

结合能曲线是由实验结果描绘而成的. 至今我们还无法从核力和核子的运动出发导出结合能公式,从而计算所有核素的质量,因而不得不借助模型来导出. 由于核的质量密度 ρ 近似是一常数;除轻核外,比结合能随 A 变化不大,因此原子核结合能与 A 成正比,因而近似地与体积成正比;且核力具有短程性和饱和性,这些和液体的基本性质很相似. 因此,可以把原子核看成是一个密度极大、不可压缩的带电的特殊液滴. 1935 年魏扎克 (C. F. von Weizscker) 提出了液滴模型.

体积能

原子核结合能的主要贡献来自与总粒子数成正比的体积能:

$$E_V = a_V A, \tag{3.2.16}$$

由于核半径正比与 $A^{1/3}$,因此 E_V 与原子核的体积成正比. a_V 称为体积能系数.

表面能

原子核表面上的核子与核中心的核子不同,它没有受到四周核子的包围,相比之下结合能要小一些,因此体积能中要减去一部分,它正比于表面积,称为表面能:

$$E_s = -a_s A^{2/3}, \tag{3.2.17}$$

a_s 称为表面能系数.

库仑能

质子间的库仑排斥导致核不稳定,使结合能变小,因此要从核结合能中减去库仑能,库仑能正比于核电荷平方,反比与原子核半径:

$$E_C = -a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}}, \tag{3.2.18}$$

a_C 称为库仑能系数. 对于均匀分布的球形核

$$a_C = \frac{3}{5}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}. \tag{3.2.19}$$

对称能和对能

上述三项可以从经典的带电液滴理解. 原子核中质子数 Z 和中

子数 N 的对称性和奇偶性对原子核结合能要贡献对称能 B_{sym} 和对能 B_p. 当 $N=Z$ 时,$B_{sym}=0$;否则,由于泡利不相容原理,当核内一种核子多于另一种核子时就要花费较多能量. 对称能是一种量子效应. 对能项可以表示为 $\delta a_p A^{-1/2}$,其中 $\delta=1$ 为偶偶核(Z 和 N 都为偶数),$\delta=0$ 为奇 A 核(偶 Z 奇 N 或相反),$\delta=-1$ 为奇奇核(Z 和 N 都为奇数). 偶偶核最稳定,奇奇核最不稳定. 自然界中存在的 280 多种稳定的核素中,偶偶核占 166 种,奇奇核只有 9 种. 这种偶偶核特别稳定、奇奇核特别不稳定的效应称为对能效应. 这也是一种量子效应. 考虑结合能的五项贡献,结合能的半经验公式为

$$\begin{aligned} E_B(Z,A) &= B_V + B_s + B_C + B_{sym} + B_p \\ &= a_V A - a_s A^{2/3} - a_C Z^2 A^{-1/3} - a_{sym}(N-Z)^2 A^{-1} \\ &\quad + \delta a_p A^{-1/2}. \end{aligned} \tag{3.2.20}$$

通过大量对已知核素相应原子质量的拟合,可以定出上式五个参量. 较好的一组参数由 A. H. Wapstra 给出:$a_V=15.835$,$a_s=18.33$,$a_C=0.714$,$a_{sym}=23.20$,$a_p=11.2$,单位为 MeV.

有了结合能公式,原子核的质量(实际是该核的原子质量,因测量的都是原子质量)立即可以写出:

$$M_a(Z,A) = [Zm_H + (A-Z)m_n] - E_B(Z,A)/c^2. \tag{3.2.21}$$

习　题

3.2.1　试用计算得到 ^{239}Pu 平均每个核子的结合能为 7.56 MeV. 所需的原子量为 239.052 158 u (^{239}Pu),1.007 825 u (质子),1.008 665 u (中子).

3.2.2　质子、^{12}C 和 ^{238}U 的原子量分别为 1.007 825 u, 12.000 000 u, 238.050 785 u. 如果质子的质量定义为原子的质量单位 1.000 000 u,求相应 ^{12}C 和 ^{238}U 的原子量. 由此可知为什么没有定义质子的质量为原子的质量单位.

3.2.3　核子被限制在 $A=100$ 的原子核内,可用原子核半径表示核子的位置不确定性. 根据不确定原理计算该核子的动能.

3.2.4　因为中子不带电,其质量不能用质谱仪测量. 当一个静止的中子和质子相遇时,它们复合成一个氘核,并发射能量为 2.2233 MeV 的 γ 射线. 氘核和质子的原子量为 2.014 102 u 和 1.007 825 u. 求中子的质量.

3.2.5 由原子核结合能半经验公式推导出β稳定线上原子核的 Z 和 A 满足的关系式.

3.3 原子核结构模型

3.3.1 费米气体模型

费米气体

按照"液滴"的观点,核子的平均自由程应该是非常短的,但实验证明,核内核子的平均自由程大于核子间距离,在很多情况下甚至比原子核线度还大.这是由于在液滴模型中,我们忽略了支配微观世界的泡利原理.处在基态的核,低能态都填满了核子,如果两个核子发生碰撞而改变状态,按泡利原理,只能到高能态去,所以核子在核中能独立运动,其余核子对它的影响,表现为一个平均势场,使核子约束在核内.据此,韦斯科夫 (V. Weisskopf) 提出了费米气体模型,质子和中子都是费米子.在这个模型中,核子之间没有相互作用,原子核可看作费米气体.

费米能级

如果将原子核看成是一个边长为 a 的立方盒子.每个核子约束在其中独立运动,不能出现在盒子外.这相当于盒子边界上存在无限高的势垒,核子波函数在边界上的数值为零,由薛定谔方程解出核子的波函数为

$$\psi = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin k_x x \cdot \sin k_y y \cdot \sin k_z z, \tag{3.3.1}$$

其中

$$k_x a = n_x \pi, \quad k_y a = n_y \pi, \quad k_z a = n_z \pi, \tag{3.3.2}$$

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \cdots. \tag{3.3.3}$$

在 k_x, k_y, k_z 组成的三维 $\boldsymbol{k}$ 空间的第一象限中,每一个点 k_x, k_y, k_z 都对应一个量子态,在 $\boldsymbol{k}$ 空间占据的体积为 $(\pi/a)^3$,在 k 到 $k+\mathrm{d}k$ 的体积中的总量子态的数目为

$$dN = \frac{1}{8} \times 4\pi k^2 dk \times \left(\frac{a}{\pi}\right)^3 = \frac{\pi}{2}\left(\frac{a}{\pi}\right)^3 k^2 dk, \quad (3.3.4)$$

当原子核处于基态时，$k \leqslant k_F$ 的量子态全部被核子填满，而 $k > k_F$ 的量子态完全空着，k_F 称为核子的费米波矢，由核子填充的总量子态数 $N(k)$ 决定：

$$N(k) = \int_0^{k_F} dN = \int_0^{k_F} \frac{\pi}{2}\left(\frac{a}{\pi}\right)^3 k^2 dk = \frac{\pi}{6}\left(\frac{a}{\pi}\right)^3 k_F^3, \quad (3.3.5)$$

$$k_F^3 = 6\pi^2 \frac{N(k)}{a^3} = 6\pi^2 n(k). \quad (3.3.6)$$

质子和中子都是自旋为 1/2 的费米子，因此每一个量子态只能填充两个质子和两个中子. 如果假设原子核具有相同的质子数和中子数，则原子核的质量数 $A = 4N(k)$，相应的核子的平均密度为

$$\rho = \frac{A}{a^3} = \frac{2}{3\pi^2} k_F^3. \quad (3.3.7)$$

核子平均数密度的实验值约为 0.170 fm^{-3}，由此可得费米波矢约为 1.36 fm^{-1}. 相应的费米动能为

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \approx 38\ MeV, \quad (3.3.8)$$

核子的平均动能为

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{A}\int_0^{k_F} 4dN \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5}E_F \approx 23\ MeV. \quad (3.3.9)$$

费米气体模型仅仅引入三个参数核物质的平均密度 $\rho = 0.170\ fm^{-3}$、每个核子的平均势能 $V_0 = -39$ MeV 和 $V_1 = 84.24$ MeV，就相当成功地解释了结合能半经验公式. 但是这个模型比较简单，对原子核的许多性质只能作初步定性的估计.

3.3.2 壳层模型(shell model)

原子核存在壳层结构的实验事实

1932 年，巴特勒特(J. H. Bartlett)和埃尔萨塞(W. M.

Elsasser)①指出：当质子数或中子数取 2，8，20，28，50，82，126 其中之一时，原子核特别稳定. 这些数称为幻数，具有幻数的原子核称为幻数核. 当质子数和中子数都是幻数时，称为双幻核，如${}^4_2He$，${}^{16}_8O$，${}^{40}_{20}Ca$，${}^{48}_{20}Ca$，${}^{56}_{28}Ni$，${}^{132}_{50}Sn$，${}^{208}_{82}Pb$ 等，特别稳定. 这和原子的壳层结构中出现的原子序数等于 2，10，18，36，54，…时元素最稳定类似，有人自然地想到了原子核中是否也有壳层结构. 当时主要的证据包括同位素的数目，α 粒子发射能和元素的丰度. 埃尔萨塞试图以中子和质子独立地在一单粒子势阱中运动来理解这种稳定性，但他们只能说明前三个幻数. 由于原子核没有固定的中心和核力的短程性，似乎不可能用一光滑的平均势来描述核子所感受到的真实势能，他们的工作没有得到重视.

下面从几个实验事实介绍幻数核的稳定性. (1) 原子核质量的壳修正：从原子核结合能的半经验公式可以计算原子核的质量，但是它不能给出原子核质量的精细结构，恰恰这些精细结构反映了原子核的壳层结构. 从($M_{实验}-M_{液滴模型}$)与中子数 N 的关系了解到，当 $N=2$，8，20，28，50，82，126 时，($M_{实验}-M_{液滴模型}$)为负值，表明这些核素的质量比邻近核素小，即其结合能较大，比较稳定. 同样当质子数取这些幻数时也有类似的情况. (2) 每当中子数取幻数后开始，中子的分离能陡然下降. 类似于原子壳层结构中的碱金属原子，当中子数取幻数时，原子核处于一个满壳层，结合得比较紧密，再加上一个中子时，这一中子上填充在下一个壳层上，结合得比较松散，因此分离比较容易. 质子分离能也有类似的效应. (3) 当质子数取幻数时，稳定的同位素特别多，如 $Z=50$ 的 Sn 元素，有 3 个奇 A 核的同位素和 7 个偶 A 核的同位素. 而相邻的 $Z=49$ 的 In 元素和 $Z=51$ 的 Sb 元素，都只有 2 个奇 A 核的同位素. 类似地，当中子数取幻数时，稳定的同中子异荷素特别多，如 $N=50$，稳定的同中子异荷素有 4 个，$N=82$，稳定的同中子异荷素有 7 个，而相邻的 $N=81$，一个稳定的同中子异荷素也没有，$N=83$，只有一个稳定的同中子异荷素.

---

① J. H. Bartlett, *Phys. Rev.* **41** (1932) 370; W. M. Elsasser, *J. Phys. Radiun* **4** (1933) 549; **5** (1934) 625.

(4) 中子数或质子数取幻数的核素,其第一激发态的能量比相邻核素大,从壳层结构看,对于满壳层的激发,被激发的核子将从一个壳层激发到上一个壳层,这种跨越壳层的激发所需的能量,比同一壳层中的激发所需的能量当然要大.(5) 在用不同偶-偶核素的相对丰度作为原子质量数 $A(A>50)$的函数所作的标绘上,$N=50$,82 和 126 的核素形成三个明显的峰①.

以上事实清楚地显示了原子核中存在类似于原子的壳层结构.由此可以推断,核子应在原子核内某种平均位势中作单粒子运动,否则不可能有壳层结构.是什么机制使得核子的单粒子能级具有壳层结构,而且满壳层的粒子数正好是上述幻数呢?与原子相比,原子核有几个不同的特点:(1) 在原子中,电子围绕原子核运动时主要受原子核提供的库仑长程吸引力作用,原子核中质子和中子彼此之间有强的短程吸引力,是一个"群龙无首"的多粒子体系.(2) 原子中只有一种全同粒子电子,只有一套壳层结构,原子核内有两种粒子,有两套并行的壳层结构和两套幻数,由于质子之间的库仑排斥力,在极重核内质子幻数和中子幻数并不相同.(3) 电子和原子核之间及电子之间的电磁相互作用是比较清楚的,这个多电子体系表现出的单粒子运动的特征可以用 Hartree-Fock 自洽场方法给予较满意的说明;而原子核中核子之间的相互作用核力还不是很清楚,特别是两个核子之间有很强的排斥性,自洽场方法难以处理.

相互作用势

在独立粒子模型中,假定核子独立地在核位势中运动,由于核力的短程性,这种位势类似于原子核的密度分布.被一个核子看到的位势确实正比于核的密度分布.而密度分布又类似于电荷分布,核内电荷分布可以近似用费米型分布来描述,可以认为核子所感受到的吸引平均势用 Woods-Saxon 势描述:

$$V(r)=-\frac{V_0}{1+e^{(r-c')/a'}},\quad 其中 V_0,c',a'>0. \quad (3.3.10)$$

① A. G. W. Cameron, "A New Table of Abundance of the Elements in the Solar System", Origin and Distribution of the Elements (L. H. Arens ed.), Pergamon Press, New York, 1968, p125.

遗憾的是这个势相应的薛定谔方程无解析解，为了便于理论分析，常常采用下列两种势阱来讨论，这两种势阱有解析解，并在核内区域与 Woods-Saxon 势比较接近.

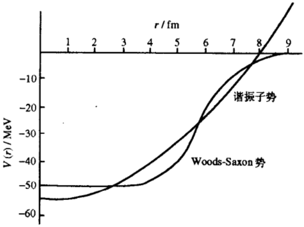


图 3.3.1　核子之间的相互作用势模型

一是谐振子势：

$$V(r) = \begin{cases} -V_0\left[1-\left(\dfrac{r}{R}\right)^2\right], & r<R, \\ 0, & r>R, \end{cases} \tag{3.3.11}$$

另一是无限深球形势阱：

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r<R, \\ \infty, & r>R, \end{cases} \tag{3.3.12}$$

有时为更好地摹拟 Woods-Saxon 势，还采用有限深球形势阱：

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r<R, \\ 0, & r>R. \end{cases} \tag{3.3.13}$$

三维各向同性谐振子的能级①由下式给出：

$$E_N = (N+3/2)\hbar\omega - V_0, \quad N = 2n_r + l,$$
$$n_r, l, N = 0, 1, 2, \cdots, \tag{3.3.14}$$

其中 n_r 为径向量子数，l 为轨道角动量量子数，决定核子和原子核的宇称. 圆频率 ω 由下式决定：

① 曾谨言，量子力学导论，北京大学出版社，1992，169 页.

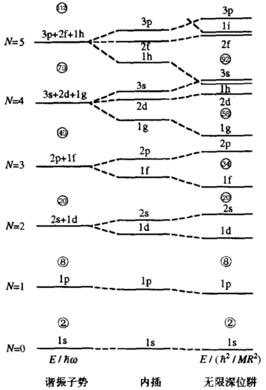


图 3.3.2 谐振子势和无限深位阱中粒子的能级

$$V = -V_0\left[1-\left(\frac{r}{R}\right)^2\right] = -V_0 + \frac{V_0}{R^2}r^2$$

$$= -V_0 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2, \tag{3.3.15}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{2V_0}{\mu R^2}}, \tag{3.3.16}$$

μ 为三维各向同性谐振子的质量.

对于给定能级 E_N，轨道角动量量子数 l 的取值为

$$l = N, N-2, \cdots \begin{cases} 1, & N \text{ 为奇数}, \\ 0, & N \text{ 为偶数}. \end{cases} \tag{3.3.17}$$

计及粒子的自旋，能级 E_N 的简并度：

$$f_N = 2\sum_{l=N,N-2,\cdots}(2l+1) = (N+1)(N+2), \tag{3.3.18}$$

也就是能级 E_N 可容纳的质子(或中子)的数目. 因此不难求出各向同性谐振子势中质子(或中子)的能级和壳层结构. 可以看出,谐振子势的最低三个壳层给出的幻数与观测值一致,更高的幻数与观测值不符. 无限深球形势阱给出的幻数为 2,8,20,34,58,92 等. 无论是各向同性谐振子势,还是无限深球形势阱势,或者介于它们之间的有限深球形势阱势或 Woods-Saxon 势都只能正确地给出较低的三个幻数.

各向同性谐振子势中质子(或中子)的能级和壳层结构如表 3.3.1 所示.

表 3.3.1

N	$(n_r+1)l$	f_N	幻数	幻数观测值
0	1s	2	2	2
1	1p	6	8	8
2	2s,1d	12	20	20
3	2p,1f	20	40	28
4	3s,2d,1g	30	70	50
5	3p,2f,1h	42	112	82
6	4s,3d,2g,1i	56	168	126

强自旋-轨道耦合壳层模型

1949 年著名物理学家玻恩的女儿美籍德国人梅耶 (Maria G. Mayer) 和德国人詹森 (J. H. D. Jensen)① 几乎同时提出,散射极化实验证实了原子核中存在较强的自旋-轨道耦合力. 因此,他们假设核子在原子核中除受一平均中心力场的作用外,还受到自旋-轨道耦合势的作用. 粒子的轨道角动量 l 不再是守恒量,核子的总角动量 $j=l+s$ 是守恒量,在有自旋-轨道耦合的情况下,$l\neq 0$ 的能级将分裂成两条,分别对应 $j=l\pm 1/2$. 每条能级的简并度为 $2j+1$. 用一级近似微扰论,可以简单估算自旋-轨道耦合导致的 $j=l\pm 1/2$ 两条能级

① M G. Mayer, *Phys. Rev.* 74 (1948) 235; 75 (1949) 1969; 78 (1950) 16; O. Haxel, J. H. D. Jensen and H. Suess, *Phys. Rev.* 75 (1949) 1766; M G. Mayer & J. H. D. Jensen, Elememtary Theory of Nuclear Shell Structure, Wiley, New York (1955).

分裂的大小，在量子数 $nljm_j$ 确定的状态，$\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}$ 的平均值为

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}\rangle &= \frac{1}{2}\langle \boldsymbol{j}^2 - \boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{s}^2\rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \\
&= \begin{cases} \frac{1}{2} l\hbar^2, & j = l + \frac{1}{2}, \\ -\frac{(l+1)}{2}\hbar^2, & j = l - \frac{1}{2}. \end{cases}
\end{aligned}
\tag{3.3.19}
$$

因此将导致自旋-轨道耦合项 $C\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}$(设 $C>0$)的变化为

$j=l+1/2$，能级下移

$$
\Delta E_1 = \frac{l}{2}C\hbar^2; \tag{3.3.20}
$$

$j=l-1/2$，能级上升

$$
\Delta E_2 = \frac{(l+1)}{2}C\hbar^2. \tag{3.3.21}
$$

能级分裂的间距为：

$$
\Delta E = (2l+1)C\hbar^2/2 \propto (2l+1), \tag{3.3.22}
$$

$l=0$ 能级不分裂. 考虑自旋-轨道耦合后，各向同性谐振子的能级及壳层结构发生变化，原来 $N=3$ 壳层中的 1f 能级分裂成两条：$1f_{5/2}$ 和 $1f_{7/2}$，其中 $1f_{7/2}$ 能级(可容纳 8 个核子)明显下降，远离上面的 $N=3$ 壳层和下面的 $N=2$ 壳层，独自形成一个壳层，构成了 Z(或 N)$=28$ 这个幻数. 属于 $N=4$ 壳层中的 1g 能级分裂后的 $1g_{9/2}$ 能级(可容纳 10 个核子)更明显下降，靠近原来的 $N=3$ 壳层的诸能级，形成了 50 这个幻数. 类似地，从原来 $N=5$ 壳层中的 1h 能级分裂后的 $1h_{11/2}$ 能级(可容纳 12 个核子)大幅度下降，靠近原来的 $N=4$ 壳层的诸能级，形成了 82 这个幻数；从原来 $N=6$ 壳层中的 1i 能级分裂后的 $1i_{13/2}$ 能级(可容纳 14 个核子)大幅度下降，靠近原来的 $N=5$ 壳层的诸能级，形成了 126 这个幻数，等等. 梅耶和詹森圆满地说明了所有的幻数，这绝非偶然的巧合，恰好是抓住了问题的关键，解决了幻数之谜. 因此他们获得了 1963 年诺贝尔物理学奖.

单粒子壳层模型

碱金属的电子壳层结构是由一个闭合的满壳层加一个价电子构成的，满壳层电子形成一个角动量为零的球对称系统．原子的总角动量是由价电子（和原子核）提供的．具有闭合壳层加一个价核子的原子核与碱金属的电子壳层结构相似①.

在壳层模型中中子和质子是独立地处理的．首先考虑一个总角动量 j 为给定数值的亚壳层，例如质子支壳层 $1p_{1/2}$，这个支壳层中有两个质子．因为质子是费米子，总波函数必须是反对称的．由于在同一壳层中，两个质子的空间波函数是对称的，因此自旋波函数必须是反对称的．由两个质子只能形成一个总的反对称态，但是仅由一个波函数来描述的态必定是自旋 $J=0$ 的态．同样的论证对质子和中子的任何闭合的亚壳层都成立．由此可得：闭合壳层的总角动量总是为零．闭合壳层的宇称为偶，因为总有偶数个核子填充它．

现在可以直接预言闭合壳层加一个粒子的核素的基态自旋和宇称．首先考虑闭合壳层外有一个质子的情况．由于闭合壳层有零角动量和偶宇称，因此原子核的角动量和宇称由价核子决定．作为这个价核子质子的角动量和宇称可以从图 3.3.3 读出，中子的相应的能级图是很相似的．例如^{5}He 的基态应确定为 $p_{3/2}$，即自旋为 3/2 和偶宇称．其他的例子如^{17}O，^{17}F，^{43}Se，^{209}Pb，^{209}Bi，壳层模型预言它们的基态分别为 $d_{5/2}$，$d_{5/2}$，$f_{7/2}$，$g_{9/2}$，$h_{9/2}$．与实验观测到的自旋宇称 $(5/2)^+$，$(5/2)^+$，$(7/2)^-$，$(9/2)^+$，$(9/2)^-$完全一致．

闭合壳层缺少一个核子的原子核，其量子数也可以从图 3.3.3 求出．这种单空穴态的角动量和宇称必须和缺少的那个核子一样．一个空穴和能够填充它的核子耦合在一起形成闭合壳层，给出的自旋宇称为 0^+．因此单空穴的这些性质是很容易理解的．从^{4}He 中移去一个中子就得到^{3}He，移去的中子是处于 $S_{1/2}$基态．壳层模型预言相应的^{3}He 的基态应为 $S_{1/2}$．实验观测到的自旋宇称为$(1/2)^+$，与壳层模型预言一致．其他单空穴核素的自旋宇称也可以相应确定，它们与

① Hans Frauenfelder, Ernest M. Henley, Subatomic physics, 2nd Edition, Prentice Hall/Englewood Cliffs, New Jersey 07632, 1991, p497.

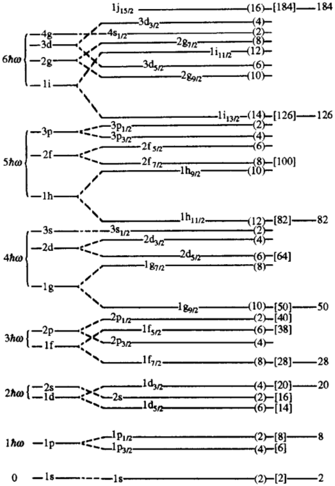


图 3.3.3 壳层模型能级图

实验值也是符合的.

壳层模型与实验的比较

这里就原子核的壳层结构、原子核的基态自旋和宇称、原子核的激发态、原子核的磁矩和电四极矩将壳层模型与实验进行比较.

(1) 由于自旋-轨道耦合势的作用,使一些具有不同主量子数和轨道角动量量子数的能级集中在一起,形成原子核的某一壳层. 壳层模型正确地解释了原子核的幻数.

(2) 基态自旋和宇称: 根据这个模型,对于偶偶核,由于质子和中子分别成对组合(自旋相反)时能量最低,故基态的自旋为零,且

宇称为正.这结果与实验完全一致.对于奇奇核,其基态自旋完全取决于最后一个奇中子和最后一个奇质子之间的耦合,由于中子和质子的自旋都是 1/2,而轨道角动量总是整数,因此耦合结果必定是整数.天然存在的奇奇核只有九个,其中四个是稳定核素,五个是长寿命的不稳定核素,包括人工制备的所有奇奇核的自旋都是整数.对于奇偶核,其基态核自旋和宇称由未配对的奇核子所处的单粒子能级的自旋和宇称决定.在原子核物理中,常用“空穴”的概念,例如$^{15}_{7}N$核被认为是从$^{16}_{8}O$ 核中挖掉一个质子后形成的.因此它的基态自旋和宇称应该是$^{16}_{8}O$ 基态上的一个质子空穴的自旋和宇称.除少数核,绝大多数核素的基态自旋和宇称的壳层模型的预言值与实验观测值完全相符.不能由壳层模型正确给出的,是由于这些核已经发生了较大的形变.

(3) 原子核的激发态:壳层模型可以解释满壳层外多一个核子或少一个核子的奇 A 核较低的激发态.$^{207}_{82}Pb_{125}$是奇中子空穴激发;$^{207}_{81}Tl_{126}$是奇质子空穴激发;$^{209}_{82}Pb_{127}$是奇中子激发;$^{209}_{83}Pb_{126}$是奇质子激发.这些激发能谱反映了双幻核$^{208}_{82}Pb_{126}$附近单粒子的激发能级.

满壳层加减一个核子的核的低激发态,常常是单粒子性质的.$^{17}_{8}O$的最后一个中子在 $1d_{5/2}$态上,对应基态$(5/2)^+$.第一激发态是$(1/2)^+$,它是最后一个中子跃迁到 $2s_{1/2}$态上所产生的.当最后一个中子激发到 $1d_{3/2}$态上产生$(3/2)^+$,能量较高.在这个能级以下,第一激发态以上还有三个能级.当内层 $1p_{1/2}$上的一个中子跃迁到 $1d_{5/2}$态上与其上的一个中子配对,$1p_{1/2}$上留下一个未配对的中子,将产生$(1/2)^-$能级.当由内层 $1p_{1/2}$上的一个中子跃迁到 $1d_{5/2}$态上,再跃迁到 $2s_{1/2}$态上,则在 $1p_{1/2}$、$1d_{5/2}$和 $2s_{1/2}$态上分别出现一个未配对的中子,它们可能产生$(3/2)^-$和$(5/2)^-$能级.

(4) 核磁矩:对磁矩的解释要比自旋的预言更差些.对偶偶核,因自旋为零,所以磁矩也为零,这与实验一致;对于奇 A 核,只能给出磁矩变化的趋势,数值上并不符合.

(5) 核的电四极矩:壳层模型可以对原子核基态的电四极矩 Q 作如下的描述:对偶偶核,由于角动量为零,表示原子核处于球形对

称状态下，因而基态的 $Q=0$；对奇中子核，由于中子不带电，中子对电四极矩没有贡献，但是由于中子的存在，会影响其他核的分布和运动，因此奇中子核基态的 $Q\neq 0$；对奇质子核，原子核基态的电四极矩由最后一个奇质子来决定. 当满壳层外有一个质子时，$Q<0$，当满壳层少一个质子时，$Q>0$. 这些定性得和实验一致. 但是实验值要比理论值大很多，有的可大几十倍.

壳层模型的改进

为了能解释更多的实验事实，人们曾对壳层模型作了两个方面的改进. 首先，认为核子之间的作用除平均场外（这是主要的），未满壳层的核子之间还有相互作用，称剩余相互作用（包括对力和四极力），经此修正后，能解释的实验事实更多也更精确了. 第二，认为把平均场看成是球对称的有心势，这对球形核是可以的，但有许多核是非球对称的，且具有永久形变. 因此，不能用球形位阱的平均场来描述，而必须假定单粒子在一个非球形对称的平均场中运动. 这就是形变壳模型. 形变壳层模型实际上是研究在固定的形变势场中核的单粒子运动，这首先由尼尔逊(S. G. Nilsson)提出，故称**尼尔逊模型**. 尼尔逊所考虑的形变势场是旋转椭球势. 在此势场中他得到许多单粒子能级图，很好地解释了原来不能解释的某些奇 A 核的自旋，如 ^{19}F、^{21}Ne、^{21}Na、^{23}Mg 等，与实验结果完全符合.

例题 3.3.1 已知下列各原子核基态的自旋、宇称，用壳层模型对这些实验值作出解释：^{3}He $((1/2)^{+})$，^{21}Ne $((3/2)^{+})$，^{27}Al $((5/2)^{+})$，^{69}Ga $((3/2)^{-})$，^{209}Bi $((9/2)^{-})$.

解 $^{3}_{2}$He$((1/2)^{+})$为奇中子核，自旋宇称由中子决定. 它填充在 1s 能级. 因此其自旋宇称为$(1/2)^{+}$.

$^{21}_{10}$Ne$((3/2)^{+})$为奇中子核，第十一个中子填充在 $1d_{5/2}$能级. 宇称由 d 轨道决定为正，但自旋应为 5/2，实验值 3/2 是因为非球形对称引起的，用 Nilsson 模型可以解释.

$^{27}_{13}$Al$((5/2)^{+})$为奇质子核，第 13 个质子填充在 $1d_{5/2}$能级. 因此自旋宇称为$(5/2)^{+}$.

$^{69}_{31}$Ga $((3/2)^{-})$为奇质子核，第 31 个质子填充在 $2p_{3/2}$，因此自旋

宇称为(3/2)$^-$.

$^{209}_{83}$Bi((9/2)$^-$)为奇质子核,第 83 个质子填充在 $1h_{9/2}$,因此自旋宇称为(9/2)$^-$.

例题 3.3.2 ^{120}Sn ($Z=50$)核由于 50 是一幻数,有一填满的质子壳层. ^{121}Sb ($Z=51$)核在这填满的壳层外有一额外的质子,根据壳层概念这个额外的质子比壳层中的质子容易移走.通过计算每种情况下所需的能量证明这一点.计算所需的原子量为: 120.903 821 u (^{121}Sb), 119.902 199 u (^{120}Sn), 118.905 819 (^{119}In). 质子的原子量为 1.007 825 u.

解 从$^{121}_{51}$Sb 移走一个质子的过程为

$$^{121}_{51}\mathrm{Sb} \rightarrow {}^{120}_{50}\mathrm{Sn} + \mathrm{p},$$

所需的能量为

$$E = [M(^{120}_{50}\mathrm{Sn}) + m_\mathrm{p} - M(^{121}_{51}\mathrm{Sb})]c^2 = 5.8\ \mathrm{MeV},$$

从$^{120}_{50}$Sn 移走一个质子的过程为

$$^{120}_{50}\mathrm{Sn} \rightarrow {}^{119}_{49}\mathrm{Tn} + \mathrm{p},$$

所需的能量为

$$E = [M(^{119}_{49}\mathrm{Tn}) + m_\mathrm{p} - M(^{120}_{50}\mathrm{Sn})]c^2 = 10.7\ \mathrm{MeV}.$$

3.3.3 集体模型 (collective model)

组成平均场的满壳层的核子在不受价核子影响时应当是球对称的,简称为核心.由于价核子对核心的强作用,核心有发生形变的趋势,这就是价核子对核的极化作用.另一方面,核心中核子间又有强吸引力,它反抗价核子的极化而力图保持球对称形状.满壳外围一个或少数几个价核子,极化作用较小,不足以使核产生稳定形变.当价核子逐渐增多时极化作用也随之增大,核心的"反抗"作用相对变小,这时核将产生稳定形变.这种稳定形变也是产生核集体运动的来源和基础.

具有大的电四极矩的核素,其核不可能是球形的.假定这些核是一个旋转椭球体,沿旋转轴方向的半径和垂直于旋转轴方向的半径分别为 c 和 a. 常用畸变参量 $\delta=(c-a)/R_0$ 表示核的四极变形,其中

R_0 为一具有长度量纲的参数. 实验测得，在 $150<A<190$(稀土区)和 $A>220$(锕系区)两个区域内，核有大的变形，值在 0.25～0.35 之间. 基态核为稳定变形核. 核变形将导致核的转动和振动. 核能谱图清晰地反映了这些新的运动形式的能级，因此核能谱是核的集体运动的重要实验依据.

壳层模型把原子核中的核子看成是相互独立的粒子，每一个核子只在一个球形平均势场中运动. 事实上，原子核中一大群核子相互靠近，形成一个集体，这样平均势场就不可能是静止的，而是变动的. 平均势场与所有核子的集体运动有关. 单个核子的独立运动和所有核子的集体运动相结合，这就是集体模型.

集体模型是在单粒子壳层模型的基础上考虑了核的形变和集体运动后提出的. 集体运动的本质是大量核子的相干运动 (coherent motion). 这种思想最早由雷恩沃特 (J. Rainwater) 提出，后来被著名物理学家尼・玻尔的儿子奥・玻尔 (A. Bohr) 和莫特尔逊 (B. Mottelson) 进一步发展和完善. 他们三人同获 1975 年诺贝尔物理学奖.

当满壳层外核子数很多时，球形平衡被破坏，形成非球形平衡状态，但仍然是轴对称形，因而会发生转动运动，形成转动能级. 如果原子核的转动角动量为 R，转动的薛定谔方程为

$$\frac{\hat{R}^2}{2I}\psi = E_\gamma\psi \tag{3.3.23}$$

其中 I 为转动惯量. 角动量算符 $\hat{R}^2$ 的本征值与本征函数从下式确定：

$$\hat{R}^2 Y_{J,M} = J(J+1)\eta^2 Y_{J,M} \tag{3.3.24}$$

J 为角动量量子数. 由于自旋为零的偶偶核相对于垂直对称轴的平面具有反射对称性，J 为奇数的球谐函数的宇称为奇，在反射下变号，不满足宇称守恒. J 只能取偶数. 转动能量为

$$E_\gamma = \frac{\eta^2}{2I}J(J+1), \quad J = 0,2,4,\cdots \tag{3.3.25}$$

实验表明，在远离满壳层的区域，即 $150<A<190$ 和 $A>220$，很多偶偶核的较低激发能级显示上述规律.

变形核除转动外，也有振动. 主要的振动形式是四极振动. 分为沿旋转轴方向的振动和垂直于旋转轴方向的振动两种. 振动运动不仅出现在变形核，而且也存在于球形核. 振动能级出现在原子核变形较小的近满壳层区域，这时原子核的集体运动是球形平衡状态的多极振动的叠加. 振幅不大时近似于简谐振动，特别是偶偶核的振动能级为等间隔的：

$$E_v = \left(N + \frac{1}{2}\right)h\nu \quad N = 0,1,2,3,\cdots \qquad (3.3.26)$$

实验表明，在近满壳层区域，即 $60<A<150$ 和 $190<A<220$，许多偶偶核的较低激发能级显示上述规律.

集体模型除能解释壳模型可以解释的所有实验事实外，还能解释壳模型所不能解释的，包括中、重核的低激发态能谱在内的许多实验事实，因此它比壳模型是大大前进了一步. 实际上，在振动能级上会出现一组转动能级，在转动能级上也会出现一组振动能级.

几种原子核模型各有一定的事实根据，都有其成功之处. 液滴模型以核力的饱和性和短程性为基础，说明了原子核的结合能等性质；费米气体模型比较简单，能定性地说明原子核的某些性质；壳层模型和集体运动模型比较细致地反映了原子核的结构和内部运动情况. 原子核结构的理论不断地发展和完善.

习　题

3.3.1　根据壳层模型计算 ^{13}B、^{13}C、^{13}N、^{17}O 和 ^{35}Cl 的基态自旋和宇称.

3.3.2　从处于基态的 ^{236}U 取走一个中子，需要多少能量？所需的原子量为 ^{235}U：235.043924 u；n：1.008665 u；^{236}U：236.045563 u.

3.3.3　梅耶和詹森解决了幻数之谜，建立了原子核的壳层模型. 试从 1f 能级的分裂说明第四个幻数 28 的形成.

3.3.4　参考 $^{17}_{8}O$ 分析 ^{19}F 的三个低能级的自旋宇称.

3.3.5　^{17}O 和 ^{19}O 的几个低能级中，主要差别是在 ^{19}O 有 $I^{\pi}=(3/2)^{+}$ 和 $(9/2)^{+}$ 的态，而在 ^{17}O 没有，这是为什么？

3.4 原子核的放射性衰变

在发现的二千多种核素中，绝大多数都是不稳定的，它们会自发地蜕变，变为另一种核素，同时放出各种射线. 这种现象称为放射性衰变. 1896 年贝可勒尔(Antoine-Hernri Becquerel)首先发现了铀的放射现象. 贝可勒尔因此和居里夫妇分享了 1903 年诺贝尔物理学奖.

3.4.1 放射性衰变规律

基本规律

单个放射性核素的衰变完全是一种随机事件，无法精确预言它究竟何时发生衰变. 大量的核素作为一个整体，它的衰变规律是十分确定的. 在 dt 时间内发生核衰变的原子核数目 dN，它必定正比于在 t 时刻尚存的原子核的数目 $N(t)$，正比于衰变时间的长短 dt，因此

$$-dN = \lambda N(t)dt, \tag{3.4.1}$$

λ 为比例系数，称为衰变常数(disintegration constant).

$$\lambda = \frac{-dN/dt}{N(t)}, \tag{3.4.2}$$

表示一个原子核在单位时间内发生衰变的几率. 设 $t=0$ 时原子核的数目为 N_0，则

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}, \tag{3.4.3}$$

这是放射衰变的最基本的规律. 是一个实验的统计规律，是从实验中总结出来的. 当核数目 N 很大时才成立. 所以衰变过程也存在涨落现象，即实际测量单位时间间隔内的衰变数目时并非每次都得到 $\lambda N(t)$的结果，而是围绕这个数有一起伏. 这规律只对单独存放的放射性核素（即所谓隔离物质）才适用，对于连续衰变过程中的居间物质（如 A→B→C 中的 B)则不服从这个简单规律.

半衰期

衰变常数 λ、半衰期 $\tau_{1/2}$(half-life)、平均寿命 τ 和放射性强度 A

(activity)是处理原子核衰变问题时常见的几个重要的物理量. 衰变常数 λ 上面已经讲过. 半衰期 $\tau_{1/2}$是放射性核素衰变到其原有原子核数一半所需时间. 因此

$$\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda\tau_{1/2}}, \quad \tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0.693}{\lambda}. \tag{3.4.4}$$

例如^{60}Co 的半衰期为 5.26 a (1 a=365.256 d=3.1558×10^7 s). 表示经过约 5.26 年^{60}Co 原子核数目就减少一半.

平均寿命

经时间 t 后必剩下原来的 $e^{-\lambda t}$倍. 或在 $t\to t+dt$ 的时间间隔内有 $-dN=\lambda N(t)dt$ 个原子核发生了衰变,这些原子核的寿命可以取 0 到∞秒之间的任意值,单个原子核的寿命是随机的,不确定的,但是它们的总寿命为$\int_0^\infty \lambda N(t)t dt$. 于是其平均寿命为

$$\tau = \frac{1}{N_0}\int_0^\infty \lambda N(t)t dt = \frac{1}{\lambda} = \frac{\tau_{1/2}}{\ln 2}, \tag{3.4.5}$$

可见平均寿命是衰变常数的倒数,它比半衰期长一些.

放射性强度

放射性强度 $A(t)$ (activity)是指样品在单位时间内发生衰变的次数,即衰变掉的原子核数目. 又称为放射性活度或衰变率 (decay rate). 它是时间的函数,对于隔离物质,很容易知:

$$A(t) = -dN(t)/dt = \lambda N(t) = \lambda N_0 e^{-\lambda t}, \tag{3.4.6}$$

即单位时间内发生衰变的核数就是该时刻核数 $N(t)$的变化率, 但对居间物质,

$$A(t) = \lambda N(t) \neq -dN(t)/dt, \tag{3.4.7}$$

即这时 $A(t)$不再等于 $N(t)$的时间变化率了.

放射性强度的单位是居里(Ci),因居里夫人而命名. 居里夫妇因研究放射性和贝可勒尔分享了 1903 年诺贝尔物理学奖.

$$\begin{aligned} &1\ \text{居里(Ci)} = 3.7\times 10^{10}\ \text{次核衰变/秒}, \\ &1\ \text{毫居(mCi)} = 3.7\times 10^{7}\ \text{次核衰变/秒}, \\ &1\ \text{微居}(\mu\text{Ci}) = 3.7\times 10^{4}\ \text{次核衰变/秒}. \end{aligned} \tag{3.4.8}$$

容易算出,1g ^{226}Ra 的放射性强度就近似为 1 Ci. 实际上,1 Ci 的早期定义就是: 1g ^{226}Ra 在 1 秒内的放射性衰变数.

放射性强度的另外一种单位是贝可[勒尔]：

$$1\ 贝可[勒尔](\mathrm{Bq}) = 1\ 次核衰变/秒,$$

因此 $1\ \mathrm{Ci}=3.7\times10^{10}\ \mathrm{Bq}$.

比放射性

放射性强度与放射性物质总质量之比称为比放射性：

$$A' = A/m, \tag{3.4.9}$$

A'越大放射性物质的纯度越高. 例如 1 克纯^{60}Co 的放射性强度约 1200 Ci，目前生产的^{60}Co 源的比放射性最高可达 700 Ci/g.

例题 3.4.1　在一岩石样品中，测得^{206}Pb 对^{238}U 核的比为 0.65，^{238}U的半衰期为 4.5×10^9 年，求此岩石的年龄.

解

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t},$$

$$t = \frac{1}{\lambda}\ln\frac{N_0}{N(t)} = \frac{\tau_{1/2}}{\ln 2}\ln\left(\frac{N(t)+N_{\mathrm{Pb}}}{N(t)}\right)$$

$$= \frac{\tau_{1/2}}{\ln 2}\ln\left(1+\frac{N_{\mathrm{Pb}}}{N(t)}\right)$$

$$= 3.3\times10^9\ \mathrm{a}.$$

^{14}C 技术

用衰变规律可确定地质年代，在活的和死亡的生物有机体内含有少量的放射性核素^{14}C，由核素图可知^{14}C 会发生 β^-衰变，^{14}C 的半衰期为 5730 年. ^{14}C 是由于宇宙线中的中子轰击上层大气中的氮核而产生的：$n+{}^{14}\mathrm{N}\to{}^{14}\mathrm{C}+p$. 它的浓度，也就是^{14}C 与^{12}C 的含量之比为 1.3×10^{-12}. 在活生物体新陈代谢过程中，碳元素进入活体，不断新陈代谢，因此活机体内^{14}C 的浓度与大气中^{14}C 的平衡浓度是一样的. 如果有机体死亡，新陈代谢停止，^{14}C 不能再补充，但又要不断衰变，其浓度降低. 因此，通过测定古代生物遗骸中^{14}C 的浓度就可以确定它的死亡年代.

例题 3.4.2　在考古工作中观测到某死亡生物体中^{14}C 的放射性为 A 次衰变/min·g，用同样方法观测到同种活的生物体中^{14}C 的放射性为 A_0 次衰变/min·g，^{14}C 的平均寿命为 τ，求此生物体的死亡时间.

解

$$\tau = \frac{1}{N_0}\int_0^\infty \lambda N(t) t \mathrm{d}t = \frac{1}{\lambda}, \quad \frac{A}{A_0} = \frac{\lambda N_0 \mathrm{e}^{-\lambda t}}{\lambda N_0} = \mathrm{e}^{-\lambda t},$$

$$t = \frac{1}{\lambda}\ln\frac{A_0}{A} = \tau\ln\frac{A_0}{A}.$$

3.4.2 衰变能和衰变的能量条件

所谓衰变能是指放射性衰变过程中所释放的能量,它常表现为衰变产物的动能,一般用 E_d 表示.由于衰变过程是个自发过程,所以总有 $E_d>0$,这就给出了原子核能否发生某种衰变的能量条件.E_d 可根据能量(指总能量,即动能加静能)守恒关系求得.

α 衰变

α 衰变为

$${}^{A}_{Z}\mathrm{X} \to {}^{A-4}_{Z-2}\mathrm{Y} + \alpha, \tag{3.4.10}$$

${}^{A}_{Z}\mathrm{X}$ 称为衰变母核(parent nuclide),${}^{A-4}_{Z-2}\mathrm{Y}$ 称为衰变子核(daughter nuclide).只要满足能量条件:

$$E_d = M(Z,N)c^2 - M(Z-2,N-2)c^2 - M_\alpha c^2 > 0, \tag{3.4.11}$$

原则上即可发生 α 衰变.

天然放射性元素主要在四个放射系中①,如表 3.4.1 所示.由于镎的半衰期和太阳系的年龄相比是如此之短,即使在太阳系形成时含有${}^{237}_{93}\mathrm{Np}$,到现在也极难找到它的残存物了.锕系的初始核素为${}^{235}_{92}\mathrm{U}$,系列的终点核素为${}^{207}_{82}\mathrm{Pb}$,起初以为此系列的初始核素为${}^{227}_{92}\mathrm{Ac}$,故称为锕系,直到 1935 年才知道是${}^{235}_{92}\mathrm{U}$.由于${}^{235}_{92}\mathrm{U}$ 的半寿命比${}^{238}_{92}\mathrm{U}$ 短得多,所以现在自然界中铀矿的 97%为${}^{238}_{92}\mathrm{U}$,而${}^{235}_{92}\mathrm{U}$ 约占 3%,正是我们利用核能所需要的同位素.在自然界中也存在一些含量不丰富的原子序数小于 82 的 α 放射性的的核素.

---

① Arthur Beiser, Concept of Modern Physics, 5th Ed., McGraw-Hill, Inc. New York(1995) p429.

表 3.4.1

质量数	系	母核	半衰期/a	稳定终点核素
$4n$	Thorium(钍)	$^{232}_{90}Th$	1.39×10^{10}	$^{208}_{82}Pb$
$4n+1$	Neptunium(镎)	$^{237}_{93}Np$	2.25×10^{6}	$^{209}_{83}Bi$
$4n+2$	Uranium(铀)	$^{238}_{92}U$	4.51×10^{9}	$^{206}_{82}Pb$
$4n+3$	Actinium(锕)	$^{235}_{92}U$	7.07×10^{8}	$^{207}_{82}Pb$

α 衰变机理和半衰期

大量实验事实表明，α 衰变的半衰期 $\tau_{1/2}$的对数与 α 粒子的能量 E_α 的平方根成反比：

$$\ln\tau_{1/2} \propto E_\alpha^{-1/2}, \tag{3.4.12}$$

因此对不同的同位素，E_α 的变化不大，但是半衰期 $\tau_{1/2}$的变化很大. α 衰变产生的 α 粒子来自原子核. 在原子核内，α 粒子受到核力吸引，但是在核外，α 粒子将受到库仑力的排斥. 这样在核表面就形成一个势垒，可以估算其高度约为几十 MeV. 但势垒穿透的几率对势垒高度和宽度极为敏感，表现为 α 衰变的半衰期与发射出的 α 粒子的能量 E_α 很敏感. 随着 E_α 减小，半衰期急剧增大. 自然界中只在重核区观测到 α 衰变. 观测到的 α 粒子的能量 E_α 大多在 4～7 MeV 范围内，远低于势垒. 按照量子力学的势垒贯穿理论，α 粒子有一定的几率 P 从原子核内逸出：

$$P = e^{\frac{4Z_Y}{\sqrt{E_\alpha}}-3\sqrt{Z_Y R}}, \tag{3.4.13}$$

其中 Z_Y 为衰变后子核的电荷数，$R\approx1.2(A_Y^{1/3}+A_\alpha^{1/3})$，这里 A 为核子数. α 粒子在单位时间内撞击势垒的次数为

$$n = \frac{v}{2R_P} = \sqrt{\frac{2E_k}{m}}\frac{1}{2R_P}, \tag{3.4.14}$$

其中 R_P 为母核的半径，则 α 衰变的衰变常数为 $\lambda=nP$，半衰期为

$$\tau_{1/2} = \frac{0.693}{\lambda}, \tag{3.4.15}$$

由此可得：

$$\ln\tau_{1/2} = AE_\alpha^{-1/2} + B. \tag{3.4.16}$$

这就是著名的盖革(H. Geiger)-努塔耳(M. Nutall)定律. 它给出了与实验一致的半衰期和 α 粒子能量的关系. 说明从隧道效应解释 α 衰变是正确的.

β 衰变

β 衰变是核电荷改变而核子数不变的核衰变. 它有三种形式, 即 β^- 衰变、β^+ 衰变和轨道电子俘获(EC)(多数情况是 K 壳层俘获), β 衰变中发出的电子能量不是分立的, 而有一个连续变化的分布. 见图 3.4.1.

正是根据此现象以及能量动量守恒的考虑, 1930 年泡利提出中微子假说, 认为在 β 衰变过程中, 同时有另外一种粒子, 即中微子发射出来, 两个轻子分享原子核释放的能量.

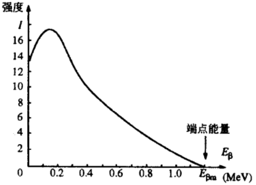


图 3.4.1 β 衰变中发出的电子能量

由于中微子不带电, 又几乎无质量, 直到 1956 年才在实验中观测到. 费米认为电子和中微子是在衰变中产生的. 它们事先并不存在于原子核内, 中子和质子可视为核子的两个不同状态, 中子与质子之间的转变相当于从一个量子态到另一个量子态的跃迁, 类似于原子从一个原子态跃迁到另一个原子态产生光子, 不过导致光子产生的是电磁相互作用, 而导致电子和中微子产生的是一种新的相互作用. 1934 年费米提出了弱相互作用的 β 衰变理论, 弱相互作用至今依然被认为是物理学中最基本的相互作用之一.

β 稳定核中中子数和质子数有一定的比例关系. 对于轻 β 稳定核, $N \sim Z$. 对于中重核, 由于库仑排斥力影响, β 稳定核的 $N > Z$. 由于壳层效应和奇偶差, 对给定的 A, β 稳定核的(Z, N)组合可能不止一个, 或者说, 一个元素的 β 稳定同位素往往不止一个. 自然界中每一种元素都至少有一个 β 稳定同位素. N 太大(丰中子核)将导致发生 β^- 衰变, 而 N 太小(贫中子核)则会发生 β^+ 衰变或电子俘获. 原子

核的β稳定性取决于吸引的短程核力与排斥的长程库仑力之间的竞争，并且要考虑原子核是一个量子体系，泡利原理在此起了重要作用.

β^-衰变可以一般地表示为

$$ {}_Z^AX \to {}_{Z+1}^{\ A}Y + e^- + \bar{\nu}_e, \tag{3.4.17}$$

衰变的衰变能为

$$E_d(\beta^-) = [M(Z,A) - M(Z+1,A)]c^2, \tag{3.4.18}$$

因此产生β^-衰变的条件为

$$M(Z,A) > M(Z+1,A). \tag{3.4.19}$$

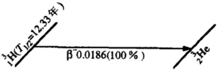


图 3.4.2 氚的β^-衰变

因为氚(${}_1^3H$)和${}_2^3He$的原子量分别是 3.016 049 7 u 和 3.016 029 7 u，β^-衰变条件成立，故${}_1^3H$发生β^-衰变，见图 3.4.2.有

$$ {}_1^3H \to {}_2^3He + e^- + \bar{\nu}_e. \tag{3.4.20}$$

氚是热核武器的重要原料，半衰期为 12.33 a.

β^+衰变可以表示为

$$ {}_Z^AX \to {}_{Z-1}^{\ A}Y + e^+ + \nu_e, \tag{3.4.21}$$

β^+衰变的衰变能为

$$E_d(\beta^+) = [M(Z,A) - M(Z-1,\ A) - 2m_e]c^2. \tag{3.4.22}$$

$$ {}_7^{13}N \to {}_6^{13}C + e^+ + \nu_e, \tag{3.4.23}$$

${}_7^{13}N$是${}_6^{12}C$吸收一个质子后形成的产物.

β衰变的第三种形式为轨道电子俘获(EC).母核有时俘获核外轨道上的一个电子，使母核内的一个质子转化为中子，过渡到子核，同时放出一个电子中微子，这就是轨道俘获.由于 K 电子最靠近原子核，因此，K 电子俘获最容易发生.轨道电子俘获一般可以表示为

$$ {}_Z^AX + e_i^- \to {}_{Z-1}^{\ A}Y + \nu_e, \tag{3.4.24}$$

于是从 i 壳层俘获电子的衰变能为

$$E_d(\mathrm{EC}) = [M(Z,A) - M(Z-1,A)]c^2 - \varepsilon_i. \quad (3.4.25)$$

其中的 ε_i 为被俘获电子所在壳层的电子结合能(即电离能). EC 过程多发生在离核最近的 K 壳层(称 K 俘获),这时 $\varepsilon_i=\varepsilon_K$,因有 $\varepsilon_K>\varepsilon_L>\varepsilon_M>\cdots$,故有可能出现如下情况:

$$\varepsilon_K > [M(Z,A) - M(Z-1,A)]c^2 > \varepsilon_L, \quad (3.4.26)$$

即核的能量不足以俘获 K 层电子而可以俘获 L 层电子,这时,该原子核将不能发生 K 俘获,而可能发生 L 俘获. 通常,$2m_ec^2\gg\varepsilon_i$,故从能量角度看,凡可发生 β^+ 衰变的核也必然能发生 EC 过程. 反之,能发生电子俘获的原子核常常不一定发生 β^+ 衰变. 由于轨道电子被俘获,子核外将有一个空穴,接着将会产生特征 X 射线或俄歇电子. ^{64}Cu是 β^-、β^+衰变和 EC 都可能发生的核素,见图 3.4.3. 发生 β^-衰

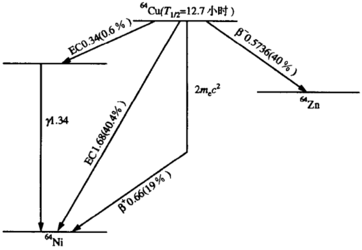


图 3.4.3 ^{64}Cu 的衰变纲图

变的几率为 40%;发生 K 电子俘获衰变到^{64}Ni 的激发态的几率为 0.6%;发生 K 电子俘获衰变到^{64}Ni 的基态的几率为 40.4%;另外有 19%的几率以 β^+衰变方式衰变到^{64}Ni 的基态.

根据 $E_d>0$ 的要求,可容易地得到发生 β 衰变的能量条件. 应该指出:这里的 M 同样是中性原子的质量而不是核的质量. 但和前面不同,这里 Z 个电子的质量并非都能自动抵消,三种衰变有各自不同的情况,需作具体分析,这点必须注意.

γ衰变

当原子核发生α、β衰变时，往往衰变到子核的激发态，处于激发态的原子核是不稳定的，它要向低能态跃迁，同时放出γ光子. 原子核从激发能级经过自发发射跃迁到较低能级时，发射的光子能量较大，在keV到MeV范围，相应的波长很短，比X射线的波长还短，人眼不能觉察，常称为γ射线. γ光子的能量可以是分立的，也可以连续变化. 在γ衰变中，原子核的组成(Z,N)不变. 它的衰变能就是原子核从高能态向低能态跃迁时所释放的能量，即原子核两能级之能量差.

$$E_d = \Delta E = E_i - E_f. \qquad (3.4.27)$$

γ衰变也有三种形式：γ辐射（放出γ光子）、内转换（在某些情况下，原子核从激发态向较低能级跃迁时，不一定放出γ光子，而是将能量交给核外的壳层电子，使电子离开原子，释放的电子称为内转换电子）和电子对内转换（放出一对正、负电子）. 在这过程中，若都忽略子核的反冲能量（一般该能量都很小），则衰变能可分成：(1) γ光子的能量；(2) 内转换电子的动能和它在原子中的结合能之和；(3) 正、负电子对的总能（包括静能和动能）. ^{60}Co的半衰期为5.27 a，以β^-衰变到^{60}Ni的2.5 MeV的激发态，β^-粒子的最大能量为0.309 MeV，^{60}Ni的2.5 MeV的激发态寿命极短，它放出1.17 MeV和1.33 MeV两种γ射线而跃迁到基态，见图3.4.4. 医学上常用^{60}Co产生的γ射线照射癌细胞，但γ射线的强度依照母核的半衰期随时间衰减，医院必须定期更换钴源.

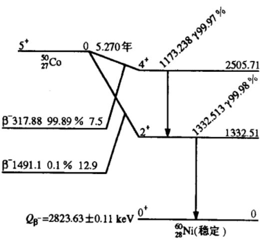


图 3.4.4 ^{60}Co的衰变纲图

衰变纲图

原子核的衰变过程可以用和原子中的能级跃迁图相类似的图形

来表示，这就是衰变纲图. 如图 3. 4. 5.

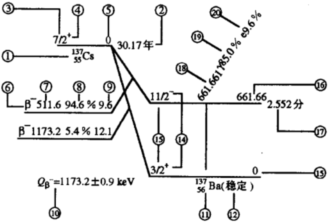


图 3. 4. 5　$^{137}_{55}$Cs 衰变纲图

编号说明：① 衰变核素符号；② 衰变核素的半衰期；③ 衰变核素的自旋值；④ 衰变核素的宇称；⑤ 衰变核素的基态，用粗黑线表示，基态能量值为 0；⑥ 衰变核素的衰变类型；⑦ 衰变时放出粒子的能量，单位是 keV；⑧ 衰变时放出粒子的分支比；⑨ β 衰变的比较半衰期 ft①，即 $\log ft$ 值；⑩ Q 表示衰变能，表示衰变前后整个系统静止能量的减少；⑪ 子核的核素符号；⑫ 表明子核的基态是稳定的，不再衰变. 如果子核是不稳定的，就在其基态线旁列出半衰期并标明衰变类型；⑬ 子核基态及激发态的自旋值；⑭ 子核基态及激发态的宇称值；⑮ 表示子核基态；⑯ 表示子核激发态的能量值，以 keV 为单位；⑰ 表示子核长激发态寿命的半衰期，图中用较粗的黑线表示这种同核异能态；⑱ 表示 γ 跃迁中 γ 射线能量值，以 keV 为单位；⑲ 表示 γ 射线的绝对强度；⑳ 表示内转换电子的绝对强度.

有的放射体 β 衰变可以同时发生 β^- 衰变、β^+ 衰变和电子俘获，它们各占一定的概率（分支比），这时的衰变纲图要复杂些. 同时，一个完整的纲图还应反映出这一衰变过程的一些主要特征，如衰变类型及其分支比、射线能量、能级特性（包括能量值、自旋和宇称）、母核的半衰期等. 以 ^{64}Cu 的 β 衰变纲图为例，这一衰变过程的一些主要特性都一一标明在图中了（12. 7 h 是母核的半衰期）. 其中 β^+ 衰变的画

① Hans Frauenfelder, Ernest M. Henley, Subatomic physics, 2nd Edition, Prentice Hall/Englewood Cliffs, New Jersey 07632, 1991, p315.

法是先画一竖线(代表能量为 $2m_0c^2$ 的间隔),然后再向左画一箭头,这表示要发生 β^+ 衰变,母核(原子)和子核(原子) 的能量差必须大于 $2m_0c^2$. 这样,有了衰变纲图,对于这一核素的衰变情况就能有较全面的了解. 学习中对于这种纲图应予重视. 首先要看懂,然后要会应用它解决一些实际问题.

3.4.3 核衰变和核能级

我们知道,原子的能级结构可从理论和实验两个方面来确定. 但对于原子核的能级结构,由于目前对核力的了解还不很清楚,故无法直接从理论上进行计算,而只能从实验上逐步积累. 核衰变的研究正是获得原子核能级知识的重要手段.

α 衰变和核能级

许多重原子核在发生 α 衰变时往往发射多组不同能量的 α 粒子,构成 α 能谱的精细结构. 测定这些 α 粒子的能量和相对强度,可以确定子核或母核的能级结构.

多数情况下在 α 能谱的精细结构中,能量大的 α 粒子其强度也较大,其余强度较小的能量也小,组成所谓短射程 α 粒子. 这是由母核基态到子核不同能态跃迁的结果,据此可定出子核一些激发态的能量. 如 ^{212}Bi(铋)α 衰变,它可放出 6 组不同能量的 α 粒子,见图 3.4.6. 这是由母核 ^{212}Bi 基态向子核 ^{208}Tl(铊)不同能级衰变的结果. 实验中测定各组 α 粒子的动能 $E_{\alpha i}$. 即可算出相应的衰变能 E_d. 从而定出 ^{208}Tl 相应能级(基态为零能级).

还有少数核素,在发生 α 衰变时,出射的几组 α 粒子中能量最小的相对强度却很大,其他各组能量较大的相对强度都很小,它们组成所谓长射程 α 粒子. 这是由母核不同能态衰变到子核基态的结果. 如 ^{212}Po(钋)的 α 衰变,它放出 4 组不同能量的 α 粒子,其中能量最小的 α_0 的相对强度接近 100%,其他 3 组能量较大的相对强度却极小,实验测定各组 α 粒子的动能 $E_{\alpha i}$后可定出 ^{212}Po 相应的能级.

需要说明:确定能级时应由衰变能 E_{di} 来计算,而不应由 $E_{\alpha i}$ 直接计算. 这是因为 α 衰变过程中放出的总动能是 E_d,而核能级应和

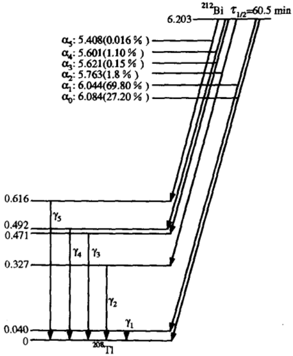


图 3.4.6 ^{212}Bi 的 α 衰变及^{208}Tl 的核能级

这总动能相联系．虽然对于重核 E_d 和 E_α 相差很小，但从物理概念上理解应是 E_d．

当 α 能谱出现精细结构时，往往会伴随着 γ 射线的出现，这是由核的激发态向低能态跃迁的结果．同时测量这些相伴产生的 γ 射线的能量，可以验证由 α 能谱获得的能级结构是否正确．

能产生长射程 α 粒子的核素只有少数几个，这是因为处于激发态的母核将很快通过 γ 衰变回到基态．只有那些 α 衰变概率很大、可与 γ 跃迁相竞争的核素，才有可能处于激发态时也有足够的几率发生 α 衰变，从而产生长射程 α 粒子（如^{212}Po的半衰期$\tau_{1/2}=3\times10^{-7}$ s，^{214}Po 的 $\tau_{1/2}=3\times10^{-4}$ s，它们是两个寿命最短的 α 放射体，可有长射程 α 粒子）．

β 衰变和核能级

某些 β 衰变体可以衰变到子核的不同能态，β 粒子可以有几组不同的最大动能，从而产生较为复杂的 β 能谱，通过对于这种复杂 β

能谱以及相伴随的 γ 能谱的测量和分析可以得到子核的能级结构. 如 ^{130}I(碘)可发射两组具有不同最大动能的 β 粒子到达子核 ^{130}Xe 的两个激发态,同时伴随几组不同能量的 γ 光子. 通过分析比较,可得出 ^{130}Xe 的几个不同能态的能量值.

和 α 衰变相比,能发生 β 衰变的核素在周期表中的分布范围更广(α 衰变多集中在重元素,而 β 放射体几乎分布在整个周期表中),因而由 β 衰变得到的核能级知识将更多些. 但因 β 能谱是连续的,讨论能级结构时应取其最大能量,作能谱分析时要比 α 能谱麻烦些. 除了由 α 能谱来确定核能级之外,根据 β 衰变的半衰期和 β 能谱的谱形,还可判断核能级的自旋和宇称. 但这已超出我们所要求的范围了.

关于 γ 衰变,它常伴随 α 衰变、β 衰变而发生,通过 γ 能谱的分析,当然可更直接地得到核能级的知识.

还须指出,对于放射衰变的研究虽然是获得核能级知识的一个途径,但它又有局限性. 这主要表现在: 研究的对象限于天然放射体(或其衰变产物),无法任意选择;所涉及的能量一般较低,得不到有关高激发态的知识. 当然,由于各种加速器的建成,种类繁多的人工放射性元素的不断出现,使上述局限性在很大程度上有所突破.

能量和动量守恒

这在前面讨论衰变能时都已涉及,这里需要说明的是所谓能量守恒是指包括静能和动能在内的总能量的守恒,单独的动能或静能都是不守恒的. 衰变能正是衰变后比衰变前所增加的动能.

另外,在导出衰变能的公式时,一般都假定衰变前母核是静止的. 若母核初始有动能,则衰变后各粒子的动能和母核初始为静止时有所不同,但衰变后动能的增量是不变的. 因此,无论母核运动与否,对衰变能的计算没有影响,所以通常都设母核静止.

衰变前后系统的总动量保持不变. 由于假定了母核的动量为零,故要求衰变后各粒子的总动量之和为零,据此可确定衰变能在各粒子间的分配. 在计算衰变产物的动能时须注意以下两个问题:

(1) 是否要考虑相对论效应? 在由动量计算动能时,若不考虑相对论效应,计算较为简单,即

$$E_k = p^2/2m_0, \tag{3.4.28}$$

式中 m_0 为粒子的静质量，若要考虑相对论效应，则动能和动量的关系应为：

$$E_k = \sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4} - m_0c^2. \tag{3.4.29}$$

判断是否要考虑相对论效应的标准，当然是粒子的运动速度：当它可和光速相比拟时就要考虑；当 $v \ll c$ 时，就可不考虑. 但在衰变问题中给出的往往是粒子的能量（动能）而不是速度，这时可用动能和静能的比较来判断. 若动能和静能可相比拟（甚至大于静能），则必须用相对论关系式(3.4.29)；若动能远小于静能，则可用经典关系式(3.4.28). 对于 α 衰变由于 α 粒子的质量较大（静能 $m_0c^2 \sim 4$ GeV），而衰变的能量一般不很大，为 MeV 量级，故可不必考虑其相对论效应. 在 β^- 衰变中，由于 β^- 粒子（电子）的静质量较小（静能 $m_0c^2 \sim 0.51$ MeV），动能往往与静能同数量级（或比静能更大），故必须考虑相对论效应，否则会引起较大误差.

(2) 反冲核的动能是否可以忽略？由于动量守恒，衰变能的一部分变成子核的反冲动能，通常比射线的能量小得多，可以忽略；如果要精确计算，则不能忽略.

3.4.4 穆斯堡尔效应

核反冲对 γ 共振吸收的影响

从原子核激发态跃迁到基态所发出的 γ 射线能否被处于基态的另一个同类原子核吸收，并使它跃迁到激发态，从而发生共振吸收，或更进一步再次放出同样能量的 γ 射线，发生共振散射呢？类似的情况在原子中是很容易实现的. 但是在原子核中就很困难了. 主要原因是光子发射和吸收过程中原子或原子核均有反冲，如果两个能级的能量差为 $E_0 = h\nu$，原子或原子核的反冲动量应该等于光子的动量 $p = h\nu/c$，则原子或原子核的反冲能量为

$$E_r = \frac{p^2}{2M} = \frac{(h\nu)^2}{2Mc^2}, \tag{3.4.30}$$

在发射过程中发射光子的实际能量就比两个能级差小，这部分反冲

能量为

$$E_{\gamma e} = E_0 - E_r, \tag{3.4.31}$$

吸收 γ 射线的原子核也有一个反冲，吸收过程中入射光子的能量应该比 E_0 大 E_r：

$$E_{\gamma a} = E_0 + E_r, \tag{3.4.32}$$

因此发射的 γ 射线与要求吸收的 γ 射线之间的能量相差 $2E_r$.

例如钠原子的 3p 激发态跃迁到基态发出 5893 Å 的 D 线，钠原子的反冲能量约为 10^{-10} eV. ^{57}Fe 的第一激发态跃迁到基态时释放能量为 14.4 keV 的 γ 光子，其反冲能量为 2×10^{3} eV，可见由于原子和原子核的质量相差无几，而原子和原子核两个能级的能量差相差甚远，因此反冲能量对光子能量的影响相差 8 个数量级，在原子中这几乎可以忽略.

能级宽度对 γ 共振吸收的影响

依照不确定关系，任何有寿命 τ 的激发态必定存在一定的能级宽度 Γ. 当能级宽度远大于反冲能量时，很容易补偿反冲能量的损失，发生共振吸收；但如果能级宽度远小于反冲能量，则很难发生共振吸收. 钠原子 3p 能级寿命约为 10^{-8} s，能级宽度约为 4×10^{-8} eV，钠原子的反冲能量约为 10^{-10} eV，能级宽度远大于其反冲能量；而 ^{57}Fe 的第一激发态跃迁到基态时释放能量为 14.4 keV 的 γ 光子，其反冲能量为 2×10^{-3} eV，第一激发态的半衰期为 9.8×10^{-8} s，其能级宽度约为 4.7×10^{-9} eV，能级宽度远小于其反冲能量. 因此在原子中共振吸收是很容易实现的，而在原子核情况下，由于两个能级的能量差及 γ 光子的能量很大，导致反冲能量很大，不能被能级宽度补偿，很难发生共振吸收.

穆斯堡尔效应

为了实现 γ 射线的共振吸收，必须设法补偿反冲能量的损失. 1958 年德国青年物理学家穆斯堡尔(R. L. Mössbauer) 利用巧妙的办法使核的反冲几乎为零. 其基本思想是把放射源和吸收体都做成固体或晶体，将原子嵌入固体晶格，原子核受到晶格束缚能的限制，遭受反冲的不再是单个原子核，而是整个晶体，它的反冲质量比

一个原子核的质量大得多，因此反冲能量完全可以忽略. 这种 γ 射线的无反冲共振吸收或散射称为穆斯堡尔效应. 由于热运动而造成的多普勒展宽也会影响上述测量，因此很多情况下是将放射源和吸收体放在低温下，这样就进一步将它们固定，减小反冲. 1961 年穆斯堡尔获得了诺贝尔物理学奖.

由于多普勒(Doppler)效应，当光源相对于观察者的运动速度 v 远小于光速 c 时，观察者所接收到的频率 ν' 和光源的放射频率 ν 之间的关系为

$$\nu' = \nu\left(1 \pm \frac{v}{c}\right), \tag{3.4.33}$$

当光源和观察者相向运动时取"＋"号，背向运动时取"－"号. 这样，接收到的光子能量 E_γ^{d} 也将和光源所发出的光子能量 E_γ^{s} 不同，其差称为多普勒能移：

$$\Delta E = E_\gamma^{\mathrm{d}} - E_\gamma^{\mathrm{s}} = \pm \frac{v}{c} E_\gamma^{\mathrm{s}}. \tag{3.4.34}$$

穆斯堡尔当时所用的实验装置如图 3.4.7 所示. 放射源用 ^{191}Os (锇)晶体，吸收体用 ^{191}Ir(铱)晶体. 放射源和吸收体都冷却到 88 K，以减小热振动的影响. 放射源装在转盘 A 的边缘上，可以相对于吸收体作前后运动，用这种多普勒运动来调节 γ 射线的能量. 放射源 ^{191}Os通过 β^- 衰变到 ^{191}Ir 的激发态，后者可放射出能量为 129 keV 的 γ 射线，如图 3.4.8 所示. γ 射线经准直后透过吸收体 ^{191}Ir 的片状晶体，被计数器 D 接收. 实验发现，当转盘不动($v=0$)时，计数器的计数降到最低，表明这时的共振吸收最强. 随着转盘转速的增大，计数迅速上升，说明共振吸收很快减小. 测量不同速度时加速器所接收到

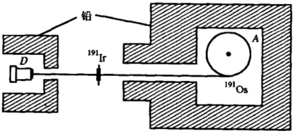


图 3.4.7　穆斯堡尔无反冲共振吸收实验装置

的 γ 射线的相对强度，就得到^{191}Ir 的 129 keV 的 γ 射线共振吸收曲线，如图 3.4.9 所示. 由图可知，在 $v=0$ 处吸收最强，而几厘米每秒的速度就足以破坏共振. 谱线的宽度很窄，约为 4.6×10^{-6} eV.

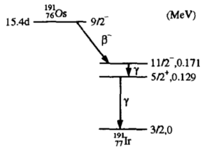


图 3.4.8 ^{191}Os 衰变纲图

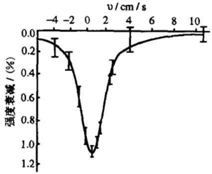


图 3.4.9 ^{191}Ir 的 γ 射线共振吸收曲线

除了^{191}Ir 以外，穆斯堡尔还观察了^{187}Re、^{177}Hf、^{166}Er 等原子核的 γ 射线的无反冲共振吸收现象. 目前已经有 45 种元素大约 100 多个核素的 120 条 γ 射线被观测到有穆斯堡尔效应，不过常温下能够应用的仅有^{57}Fe、^{119}Sn 和^{151}Eu 三种元素. 目前人们研究得最多的是^{57}Fe 的 14.4 keV 的 γ 射线，因为^{57}Fe 在室温下其穆斯堡尔效应就相当显著，因此它已经成为重要的工作物质.

由于穆斯堡尔谱的宽度极窄，因而它具有极高的能量分辨本领，可以检测出微小的能量变化. 例如^{57}Fe 的 $E_\gamma=14.4$ keV 的跃迁，其穆斯堡尔谱线的宽度 $\Gamma\sim9.3\times10^{-9}$ eV，仅为 E_γ 的 6.5×10^{-13}，任何与此量级相应的微小扰动就可以被观测到. 比如测量地球到月球的距离，可以精确到 0.01 mm. 有些核素的穆斯堡尔效应谱所能达

到的能量分辨率更高.如^{67}Zn的93.3 keV γ射线可达10^{-15}.而^{107}Ag的93 keV谱线竟达10^{-22}量级.因此穆斯堡尔效应立刻在各种精密频差测量中得到了广泛的应用.

习　题

3.4.1　一个放射性同位素的半衰期为140天.多少天后它的放射性衰变率降低到最初的1/4?

3.4.2　一放射性同位素的半衰期为6.5小时.如果样品中最初有4.8×10^{19}个放射性同位素原子,26小时后样品中还剩下多少这样的放射性同位素原子?

3.4.3　半衰期为14.28天的放射性核素^{32}P常常作为示踪原子来跟踪有磷参与的生化反应过程.在某一实验中,如果开始的计数率为3050次/秒,多长时间后降为170次/秒?用一种含有^{32}P溶液给一实验的西红柿根部施肥,3.48天后测量叶中^{32}P的发射率.为了修正从实验开始的衰变,观测值必须乘以一个什么因子?

3.4.4　1.00 g Sm以每秒120个粒子的速率α发射粒子.在块状Sm中放射性同位素^{147}Sm的自然丰度为15.0%,求其半衰期.

3.4.5　一个源含有两种磷的放射性核素$^{32}P(\tau_{1/2}=14.3\ d)$和$^{33}P(\tau_{1/2}=25.3\ d)$.起初10.0%的衰变来自$^{33}P$,等多长时间才能观测到90.0%的衰变来自$^{33}P$?

3.4.6　一个自由的中子衰变为质子、电子和反中微子.计算β能谱的最大能量K_{max}.质子和中子的原子量为1.007727 u和1.008665 u.

3.4.7　测得一克KCl的放射性强度为1600次/秒,这是其中1.18%的同位素^{40}K引起的,计算其半衰期.

3.5　原子核反应

具有一定能量的粒子轰击原子核,改变核素性质的反应称为核反应.轰击粒子的能量在150 MeV以下的称低能核反应;150 MeV到1 GeV的称中能核反应;1 GeV以上的称为高能核反应.一般的原子核物理只涉及低能核反应.按靶核的质量数来分:$A\leqslant 40$的核

反应称为轻核反应;40<A<150 的反应为中等质量核的反应;A>150 的称为重核反应. 比 α 粒子重的粒子引起的核反应统称为重离子反应.

3.5.1 几个著名的核反应

历史上第一个人工核反应

1919 年卢瑟福利用^{212}Po 放出的7.68 MeV α 粒子轰击氮气,结果发现,有五万分之一的几率发生了如下的反应:

$$\alpha + {}^{14}\text{N} \rightarrow \text{p} + {}^{17}\text{O},$$

$$ {}^{14}\text{N}(\alpha,\text{p})\,{}^{17}\text{O}, \tag{3.5.1}$$

这是人类历史上第一次人工实现使一个元素变成了另一个元素.

第一个在加速器上实现的核反应

1932 年,英国考克拉夫(J. D. Cockcroft)和瓦耳顿(E. T. S. Walton)发明高压倍加器,并把质子加速到 500 keV,实现如下核反应:

$$\text{p} + {}^{7}\text{Li} \rightarrow \alpha + \alpha,$$

$$ {}^{7}\text{Li}(\text{p},\alpha)\,{}^{4}\text{He}, \tag{3.5.2}$$

释放出具有 8.9 MeV 动能的两个 α 粒子. 输入能量为 0.5 MeV,输出能量为 17.8 MeV. 这是释放核能的一个例子.

产生第一个人工放射性核素的反应

1934 年,法国约里奥·居里夫妇用下列反应产生了第一个人工放射性核素:

$$\alpha + {}^{27}\text{Al} \rightarrow \text{n} + {}^{30}\text{P},$$

$$ {}^{27}\text{Al}(\alpha,\text{n})\,{}^{30}\text{P}, \tag{3.5.3}$$

产物^{30}P 是 β^+ 放射性核素,半衰期为 2.6 min:

$$ {}^{30}\text{P} \rightarrow {}^{30}\text{Si} + e^{+} + \nu. \tag{3.5.4}$$

导致发现中子的核反应

发现中子的核反应是:

$$\alpha + {}^{9}\text{Be} \rightarrow \text{n} + {}^{12}\text{C},$$

$$ {}^{9}\text{Be}(\alpha,\text{n})\,{}^{12}\text{C}, \tag{3.5.5}$$

核反应式

一般情况下，假定反应后仍为两个粒子，核反应可以表示为

$$i + T \rightarrow l + R,$$

$$T(i,l)R, \tag{3.5.6}$$

这种核反应可以简写为：$T(i,l)R$.

3.5.2 反应道和反应截面

反应道和守恒定律

一个入射粒子打到靶核 T 上，可以发生的反应方式一般不止一种，而且随入射能量的增加，反应方式增多. 每一种核反应过程称为一个反应道. 例如质子轰击锂靶，实际上除了放出两个 α 粒子的反应道外，必然有弹性散射道：

$$\mathrm{p} + {}^{7}\mathrm{Li} \rightarrow \mathrm{p} + {}^{7}\mathrm{Li}, \tag{3.5.7}$$

当质子的能量超过 1.89 MeV 时，下面的反应道将开放：

$$\mathrm{p} + {}^{7}\mathrm{Li} \rightarrow \mathrm{n} + {}^{7}\mathrm{Bi}, \tag{3.5.8}$$

当质子的能量超过 5.07 MeV 时，下面的反应道将开放：

$$\mathrm{p} + {}^{7}\mathrm{Li} \rightarrow \mathrm{T} + {}^{5}\mathrm{Li}, \tag{3.5.9}$$

这是由于在核反应中电荷、核子数、角动量、总质量及相应的总能量和动量守恒. 当入射粒子的能量满足一定条件时，某种反应道才能开放.

反应截面

设靶子内每个原子核占有一个有效面积 σ，入射粒子打在 σ 内就一定发生反应. 因此，σ 又称“命中面积”. 那么，在厚度为 t、面积为 A 的箔靶内总的有效面积是 $NAt\sigma$，这里 N 代表单位体积内的原子核数. 于是，入射粒子打到面积为 A 的靶子上发生核反应的几率为

$$\frac{NAt\sigma}{A} = \frac{n_r}{n_i}, \tag{3.5.10}$$

其中 n_i 和 n_r 分别表示入射粒子和反应粒子数. 因此核反应截面的定义为

$$\sigma = \frac{n_r}{n_i N t}, \tag{3.5.11}$$

它代表一个入射粒子与靶上一个靶核发生核反应的几率. 它具有面积的量纲，单位是靶恩(b).

核反应产额

核反应产额 Y 为一个入射粒子在靶中引起的核反应几率，即在靶中反应粒子数与入射粒子数之比：

$$Y = \frac{n_r}{n_i}, \tag{3.5.12}$$

对于薄靶，很容易得到核反应产额为：

$$Y = \sigma N t, \tag{3.5.13}$$

对于厚靶，考虑中子反应的简单情况，由于中子不带电，在靶中除了与核作用发生核反应外，不与核外电子发生作用而损失能量. 因此可以认为在靶中各处中子反应截面相同. 设入射中子强度为 n_0，在靶中由于发生核反应，中子强度逐渐减少为

$$-\mathrm{d}n(x) = n(x)N\sigma\mathrm{d}x, \tag{3.5.14}$$

对上式积分可得指数衰减

$$n(x) = n_0 \mathrm{e}^{-N\sigma x}. \tag{3.5.15}$$

因此通过厚度为 t 的靶子后，中子强度为

$$n_t = n_0 \mathrm{e}^{-N\sigma t}, \tag{3.5.16}$$

中子在靶中的核反应数为

$$n_r = n_0 - n_t = n_0(1 - \mathrm{e}^{-N\sigma t}), \tag{3.5.17}$$

因此反应产额为

$$Y = \frac{n_r}{n_0} = 1 - \mathrm{e}^{-N\sigma t}. \tag{3.5.18}$$

3.5.3 *Q* 方程

反应能

在一般核反应中，i 和 T 表示入射粒子和靶核；l 和 R 表示出射轻粒子和剩余核. 用 M 和 K 表示它们相应的静质量和动能. 根据能量守恒：

$$M_i c^2 + K_i + M_T c^2 + K_T = M_l c^2 + K_l + M_R c^2 + K_R, \tag{3.5.19}$$

定义反应能 Q 为：

$$Q \equiv [(M_i + M_T) - (M_l + M_R)]c^2 = (K_l + K_R) - (K_i + K_T). \tag{3.5.20}$$

实验室中靶核一般处于静止状态，即 $K_T=0$，从而：

$$Q = K_l + K_R - K_i. \tag{3.5.21}$$

如果 $Q>0$ 称放能反应；$Q<0$ 称吸能反应.

Q 方程

一般靶核的动量为零，若入射粒子和出射轻粒子动量之间的夹角为 θ，根据动量守恒：

$$p_R^2 = p_i^2 + p_l^2 - 2p_i p_l \cos\theta, \tag{3.5.22}$$

入射粒子的能量一般在 MeV 量级，远小于入射粒子的静止能量，因此可以利用经典公式 $p^2=2MK$，将上式改写为

$$M_R K_R = M_i K_i + M_l K_l - 2\sqrt{M_i M_l K_i K_l}\cos\theta, \tag{3.5.23}$$

与(3.5.21)一起消去 K_R，可得反应能为

$$Q = \left(1 + \frac{M_l}{M_R}\right)K_l - \left(1 - \frac{M_i}{M_R}\right)K_i - \frac{2\sqrt{M_i M_l K_i K_l}}{M_R}\cos\theta. \tag{3.5.24}$$

这就是核反应的 Q 方程. 此方程与靶核的质量无关，因此通过测定入射粒子、出射粒子的动能以及它们运动方向之间的夹角，可以计算其反应能 Q，再通过(3.5.20)计算出靶核的质量，许多原子核的质量都是这样确定的.

由于入射粒子的能量远小于其静止能量，没有考虑相对论效应，因此这里的核反应的 Q 方程只适用于低能核反应，当入射粒子的能量较大时，必须考虑相对论效应.

Q 方程的另一个有用的表达式为

$$K_l(\theta) = [u \pm \sqrt{u^2 + \omega}]^2, \tag{3.5.25}$$

其中

$$u \equiv \frac{\sqrt{M_i M_l K_i}}{M_l + M_R}\cos\theta, \tag{3.5.26}$$

$$\omega \equiv \frac{(M_R - M_i)K_i + M_R Q}{M_l + M_R}. \tag{3.5.27}$$

由此可见,出射粒子动能 $K_l(\theta)$是出射角的函数.对一定的核反应只要已知入射粒子的动能 K_i,就可以计算出射粒子动能对出射角的函数关系 $K_l(\theta)$.这一表达式不仅对轻出射粒子成立,对剩余核也成立,只要互换 l 和 R 即可.

阈动能

为了使 $K_l(\theta)$有意义,必须有

$$u^2 + \omega \geqslant 0, \tag{3.5.28}$$

对于放能反应,$\omega>0$,上式必定成立.对于吸能反应,如果 $\omega<0$,入射能量 K_i 至少要大于某一数值才能满足上式,保证核反应的发生.K_i 的最小值由下式决定:

$$\frac{M_i M_l K_i}{(M_l + M_R)^2}\cos^2\theta + \frac{M_R Q + K_i(M_R - M_i)}{M_l + M_R} = 0. \tag{3.5.29}$$

当 $\theta=0$ 时,K_i 达到极小值,这就是吸能反应的阈动能 E_{th}:

$$E_{th} = - Q\frac{M_l + M_R}{M_l + M_R - M_i}. \tag{3.5.30}$$

由于 $M_i+M_T=M_l+M_R+\frac{Q}{c^2}$,而 $M_T \gg Q/c^2$,因此阈动能表达式近似为

$$E_{th} = - Q\frac{M_T + M_i}{M_T}. \tag{3.5.31}$$

例题 3.5.1 从处于基态的^{236}U 取走一个中子,需要多少能量?所需的原子量为 ^{235}U: 235.043 924 u, n: 1.008 665 u, ^{236}U: 236.045 563 u.

解 $Q=\Delta mc^2=[M(^{236}\text{U})-M(^{235}\text{U})-m_n]c^2=6.545\ \text{MeV}$.

例题 3.5.2 质子和氘核反应生成两个氘核,动能为 5.7 MeV 的质子入射到静止的氚核上,求此反应的 Q 值和沿入射方向两个氘核的动能. $M_H=1.007\ 825$ u, $M_D=2.014\ 102$ u, $M_T=3.016\ 049$ u.

解 此反应的 Q 值为

$$Q = [M_H + M_T - 2M_D]c^2 = - 4.03\ \text{MeV},$$

由能量守恒:

$$K_1 + K_2 = Q + K_p = 1.67\ \text{MeV},$$

由动量守恒：

$$p_1 + p_2 = p = \sqrt{2M_H K_p} = 103.4\ \text{MeV}/c,$$
$$2M_D K_1 = p_1^2, \quad 2M_D K_2 = p_2^2,$$

由此解得

$$K_1 = 0.24\ \text{MeV}, \quad K_2 = 1.43\ \text{MeV}.$$

3.5.4 核反应过程和机制

核反应三阶段

通过大量的实验和理论的研究，对于核反应的过程和核反应的机制，有了相当的积累. 对于入射粒子能量小于 150 MeV 的核反应，韦斯科夫于 1957 年提出了核反应三阶段的描述. 按核反应进行的顺序，将核反应分成独立粒子阶段、复合系统阶段和最后阶段. (1) 独立粒子阶段：当入射粒子接近靶核的作用范围时，一部分被吸收，进入核反应的第二阶段；另一部分则被靶核的势场散射，形成弹性散射，称为势弹性散射或形状弹性散射. 入射粒子在这一阶段分成两部分，好像光线照射到半透明的玻璃体上，一部分被吸收，另一部分被反射. 这一阶段可用光学模型成功地描述. (2) 复合系统阶段：当入射粒子被靶核吸收后，即进入复合系统阶段，入射粒子和靶核组成了一个复合系统，入射粒子完全丧失了独立性. 入射粒子与靶核中的核子相互作用的情况，由入射粒子的能量决定. 当入射粒子的能量高时，它可以很快穿过靶原子核，在穿透靶核过程中，它可以和靶核中的一个或少数几个核子作用，如果这些核子在靶表面，就叫做表面直接作用；如果这些核子在靶核体内，就叫做体内直接作用. 由于入射粒子能量较高，它与靶核中的核子的相互作用只是一种微扰，它飞出靶核时比较集中在入射方向上，带有入射粒子的“记忆”. 当入射粒子能量减少时，入射粒子穿过靶核的速度较慢，与靶核中的核子相互作用的机会增多，可能产生多次碰撞的过程，这时出射粒子的方向虽然还是比较集中在小角度方向上，但是相对散开一些. 入射粒子有可能将一部分能量交换给靶核，使靶核产生集体振动、转动等激发，然后

出射，这时出射粒子也带有入射粒子的某些“记忆”. 当入射粒子能量再降低时，它与靶核中的核子多次碰撞，不断损失能量，最后停留在靶核内，组成新的复合系统，经过充分的能量交换后达到了动态平衡. 这个动态平衡的复合系统称为复合核. 这时入射粒子已经成为复合核中的一个成员，忘记了形成时的历史，丧失了“记忆”. 复合核形成后通常处于不稳定的激发态，它将衰变成各种产物而进入第三阶段. 衰变产物的角分布是各向同性或 90°对称的. 需要说明的是，以上各个过程是有重叠的. (3) 结束阶段：复合系统分解成剩余核和出射粒子. 对于入射粒子能量较高的直接作用和中间过程，入射粒子和靶核相互作用后，直接进入第三阶段. 对于复合核过程，则只有形成复合核后才开始衰变成剩余核和出射粒子. 出射粒子中，一部分的种类和能量和入射粒子完全相同，成为复合核弹性散射.

核反应机制

从有关核反应过程的描述来看，核反应的第一阶段可以用光学模型处理；第二阶段存在两种核反应机制：直接作用和复合核模型. 这三种机制简介如下.

光学模型由 1949 年费许巴赫(H. Feshbach)等人提出，它是描述核反应第一阶段，即独立粒子阶段的理论. 将这个阶段入射粒子和靶核的作用比作光波对半透明玻璃球的入射，其结果是一部分被散射(反射或透射)，一部分被吸收. 在数学处理上，该模型引进复数势，其虚部正好能反映靶核对入射粒子的吸收，而实部和粒子的被散射有关. 这种复数势又被称为光学势. 这个模型认为，入射粒子和靶核作用的结果可以不被吸收而直接被散射，即不发生内部能量交换. 只有当入射粒子和靶核核子碰撞的结果使两者都处于空着的能态时，这种碰撞对于能量交换才是有效的；否则，即使发生了碰撞，也不交换能量. 从这个意义上说，泡利原理“减弱”了核子之间的相互作用，使得靶核对于入射粒子变得“透明”了. 因而半透明球的假设是合理的.

实验发现有些核反应过程并不经过复合核，它们直接由入射粒子和靶核中少数核子发生相互作用而完成. 最常见的直接反应有削裂反应(如(D,n)、(D,p)反应等)、拾取反应(如(p,D)、(n,D)反应

等,可以看作前者的逆反应)、非弹性散射(入射粒子将部分能量直接交给靶核并使之激发)、敲出反应(入射粒子打出靶核中的一个或几个粒子,自身被靶核吸收或一起飞出)、电荷交换反应(如(p,n)、(^{3}He,T)反应),等等,这些反应都不经过任何中间过程而直接过渡到末态.

1936年尼·玻尔提出复合核模型.认为核反应可以分为两个独立的阶段,即复合核的形成和复合核的衰变.这个模型是以核子之间的强相互作用为基础的.当入射粒子落到靶核核力的作用范围时,立即和核内核子发生强烈的相互作用,经过多次碰撞,迅速交换能量,并将它带入靶核的能量很快均分给所有核子.最后达到完全的统计平衡,于是形成了复合核.在入射粒子能量不太大、靶核质量数不太小时,核内每个核子所获得的平均能量不很大,不至于立即发射出核子使复合核衰变,因此复合核可以有较长的寿命.复合核的形成和衰变可以看作两个相互独立的阶段.

直接反应和形成复合核是核反应中两个主要的、互相竞争的机制.对于一个具体的反应,可能这两种机制都存在,各有一定的几率,也可能其中的一种机制占压倒优势.通常当靶核不太轻、入射粒子能量不太高时,绝大多数核反应都经过复合核阶段;反之,则直接反应将显得重要起来.

习 题

3.5.1 用多大能量的质子轰击固定氚靶方能发生 $p+T\to n+{}^3He$ 反应?若入射质子的能量为3.00 MeV,反射的中子与质子入射的方向成90°角,求发射的中子和^{3}He的动能. $M_H=1.007\ 825$ u, $M_T=3.016\ 049$ u, $M_{^3He}=3.016\ 029$ u.

3.5.2 ^{235}U可能的裂变方式之一为: $^{235}U\to{}^{140}Ce+{}^{94}Zr+n$.计算其蜕变能.所需的原子量为: 235.043 924 u (^{235}U), 139.905 433 u (^{140}Ce), 93.906 315 u (^{94}Zr), 1.008 665 u(n).

3.5.3 填写下列核反应中缺写的核素:

$$^{116}Sn(?,p)\,^{117}Sn;\quad ^{40}Ca(\alpha,n)?;\quad ?(p,n)\,^{7}Be$$

3.5.4 目前自然界中^{235}U对^{238}U的比率为0.007 2,2.0×10^9 a以前该比率多大? 4.5×10^9 a以前地球形成时该比率多大? ^{235}U的半衰期为0.707×10^9 a, ^{238}U的半衰期为4.51×10^9 a.

3.6 原子能的利用

3.6.1 核裂变的发现

重核分裂成中等质量的核，从能量守恒的观点来看是可能的. 核素能够自身裂变的现象称为自发裂变. 除自发裂变外，入射粒子与重原子核作用发生的一个反应道可能是裂变，称为诱发裂变.

裂变现象的首次发现

费米首先在 1934 年提出并用中子轰击原子核，发现许多人工放射性核素，1938 年底哈恩(O. Hahn)和史特拉斯曼(F. Straasmann)发现，当中子轰击铀核时，在产物中存在钡那样的中重核. 接着梅特纳和弗里什对此作出了正确的解释：铀在中子轰击后分裂成两块质量差不多的碎块(后来证明两碎块的质量比约为 3∶2). 费米因此获得 1938 年诺贝尔物理学奖.

^{235}U 的裂变

^{235}U 是自然界惟一能由热中子就可引发裂变的核素，仅占天然铀的 0.72%. 裂变过程中能产生 b 个新的中子，其过程为

$$^{235}U+n\rightarrow{}^{236}U\rightarrow X+Y+bn. \qquad (3.6.1)$$

b 的平均值为 2.47. 裂变产生的碎块可以有许多组合方式，碎块的质量范围约在 75～160 之间，最可几值在 99 和 144 附近. 中子进入 ^{235}U 引起的裂变可以分裂为 ^{144}Ba 和 ^{89}Kr，也可以分裂为 ^{140}Xe 和 ^{94}Sr，以及其他 60 多种可能性. 裂变碎块必定是丰中子核，它们不可能有 β^+ 和 EC 衰变.

^{238}U 的裂变

占天然铀 99.27%的是 ^{238}U，只能由快中子(至少 1 MeV)诱发裂变. 两种过程中不会产生新的中子. 但 ^{238}U 裂变可以用来生产有用的核燃料 ^{239}Pu，^{239}Pu 和 ^{235}U 一样是最常用、最有效的裂变核素. ^{238}U 裂变过程如下：

$$n + {}^{238}U \rightarrow {}^{239}U + \gamma,$$

$$^{239}U \to {}^{239}Np + e^- + \bar{\nu}_e \quad (\tau_{1/2} = 24\ min),$$

$$^{239}Np \to {}^{239}Pu + e^- + \bar{\nu}_e \quad (\tau_{1/2} = 2.35\ d). \qquad (3.6.2)$$

自发裂变(SF)

1940 年人们首次发现铀核的自发裂变过程. 在原子序数比钍低的元素中,由于裂变势垒太高,没有发现过自发裂变的事例. ^{230}Th 有可能发生自发裂变,但相应的半衰期 $\tau_{1/2} > 1.5\times10^{17}$ a;^{235}U和^{239}Pu的 SF 半衰期分别为 1.8×10^{17} a 和 5.5×10^{15} a. 自发衰变都不是它们的主要衰变方式. ^{254}Cf 的 SF 占 99.69%,而 α 只占0.31%,$\tau_{1/2}=$ 60.5 d;$^{259}_{101}Md$,SF 占 100%,$\tau_{1/2}=1.6$ h. ^{252}Cf 的 SF 虽然只占 3%,但此自发裂变伴随中子的发射,^{252}Cf 已成为不需要加速器和反应堆的中子源.

3.6.2 裂变机制和能量

玻尔用液滴模型和复合核解释裂变过程. 中子被俘获后形成处于激发态的复合核,它将发生集体振荡变形,这时表面张力力图使原子核保持球形,库仑斥力使核变形拉长,最终有可能使它分裂. 由原子核平均比结合能图可知,当重核裂变为两块中等重核时,平均比结合能将增加 1 MeV 左右,即每个核子平均贡献 1 MeV 能量. 每个^{235}U裂变时将释放约 200 MeV 的能量. 释放的能量表现为碎块的动能,放出中子的动能,以及伴随发生的 β^- 衰变产物的动能. 大致分配如下:

碎块的动能	170 MeV	
裂变中子的动能	5 MeV	
β^-粒子和 γ 粒子的能量	15 MeV	
与 β^- 相伴的 $\bar{\nu}_e$	10 MeV	(3.6.3)

除中微子及某些 γ 光子逃之夭夭外,余下的约 185 MeV 能量都能利用,比化学反应中一个原子提供的能量几乎大一亿倍. 由于产生的新中子继续与其他的^{235}U 发生反应,这种链式反应就能自持,大规模利用裂变原子能就有可能. 如果^{235}U 的体积不大,中子就很容易从表面逃逸,自持的链式反应无法进行,只有当它的体积超过"临界体积"

时，才能发生自持的链式反应. 1945 年我国物理学家卢鹤跋首次提出了估算^{235}U 原子弹及费米型反应堆临界体积的简易方法.

为什么有些重核(例如^{235}U 和^{239}Pu)可以用热中子引发裂变，而其他一些重核(例如^{238}U)就不能？玻尔等回答了这个问题. 裂变势垒 E_b 必须被克服. 如果吸收一个热中子后提供的激发能为 E_n，大于裂变势垒 E_b，则吸收热中子后产生的新核就能发生裂变. 而吸收一个热中子后提供的激发能 E_n 就等于从重核中取走一个中子需要的能量. ①

例题3.6.1　一个增压水热电厂反应器核心的热功率为 3400 MW，发电功率为 1100 MW，110 t 氧化铀中含 3% ^{235}U 86 000 kg，做成 57 000 个燃料棒. 求：此发电厂的效率，反应器核心的衰变率，^{235}U 每天的消耗量，这些核燃料能使用多长时间？在反应器核心质量丢失率多大？

解　发电厂的效率为发电功率与热功率之比：$\frac{1100}{3400}=32.4\%$.

平均每次裂变放出的能量为 200 MeV，每秒 3400 MJ 对应的裂变次数为

$$A = 1.06 \times 10^{20}\,\mathrm{s}^{-1},\quad 1\,\mathrm{MeV} = 1.6 \times 10^{-13}\,\mathrm{J},$$

考虑到有 $A/4$ 的中子被^{235}U 俘获而不发生裂变，因此^{235}U 的总消耗率为

$$\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t} = 1.25A \times \frac{0.235\,\mathrm{kg/mol}}{6.02 \times 10^{23}\,\mathrm{mol}^{-1}} = 5.19 \times 10^{-5}\,\mathrm{kg/s}$$
$$= 4.5\,\mathrm{kg/d}.$$

^{235}U 在 86000 kg 中含 3%，为 2600 kg，可以使用的时间为

$$T=\frac{2600}{4.5}=580\,\mathrm{d}.$$

在反应器核心质量丢失率为

$$\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}E/\mathrm{d}t}{c^2}=\frac{3.4 \times 10^9\,\mathrm{W}}{(3.0 \times 10^8\,\mathrm{m/s})^2}$$

---

① D. Halliday, R. Resnick, K. S. Krane, *Physics*, John Wiley & Sons, Inc., 1992, 4th Edition, p1170.

$$= 3.8 \times 10^{-8}\,\mathrm{kg/s} = 3.3\,\mathrm{g/d}.$$

3.6.3 轻核聚变及其基本条件

轻核聚变

所谓原子能主要指原子核结合能发生变化时释放的能量. 从比结合能图看，在轻核区比结合能变化很大. 轻核聚合引起结合能的变化而获得能量的方法称为轻核的聚变. 下面是几个重要的聚变反应：

$$\begin{aligned}
&{}^{2}\mathrm{H} + {}^{2}\mathrm{H} \to {}^{3}\mathrm{He} + {}^{1}\mathrm{n} + 3.25\,\mathrm{MeV},\\
&{}^{2}\mathrm{H} + {}^{2}\mathrm{H} \to {}^{3}\mathrm{H} + {}^{1}\mathrm{H} + 4.00\,\mathrm{MeV},\\
&{}^{3}\mathrm{H} + {}^{2}\mathrm{H} \to {}^{4}\mathrm{He} + {}^{1}\mathrm{n} + 17.6\,\mathrm{MeV},\\
&{}^{3}\mathrm{He} + {}^{2}\mathrm{H} \to {}^{4}\mathrm{He} + {}^{1}\mathrm{H} + 18.3\,\mathrm{MeV},\\
&{}^{6}\mathrm{Li} + {}^{2}\mathrm{H} \to 2\,{}^{4}\mathrm{He} + 22.4\,\mathrm{MeV},\\
&{}^{7}\mathrm{Li} + {}^{1}\mathrm{H} \to 2\,{}^{4}\mathrm{He} + 17.3\,\mathrm{MeV}.
\end{aligned} \tag{3.6.4}$$

这些放能反应在实验室已经观测到，问题是怎样能够大量发生. 前四个反应的总效果为

$$6\,{}^{2}\mathrm{H} \to 2\,{}^{4}\mathrm{He} + 2\,{}^{1}\mathrm{H} + 2\,{}^{1}\mathrm{n} + 43.15\,\mathrm{MeV}. \tag{3.6.5}$$

平均每个^{2}H 放出 7.2 MeV，平均每个核子的贡献为 3.6 MeV. 大约是^{235}U 由中子诱发裂变时平均每个核子贡献的 4 倍左右. 海水中氢与氘的原子数比是 1 ∶ 0.00015，按质量计算，氘结成的水大约占海水的六千分之一. 而地球表面海水总量约为 10^{21} kg，每克氘经聚变可以放出 10^{5} kW · h 的能量，所以海水蕴藏的氘能提供的聚变能为 10^{25}kW · h，这样巨大的能量怎样才能利用呢？

聚变截面

由于氘核-氘核、氘核-氚核和氘核-^{3}He 的反应截面是氘核动能的函数，氘核必须有 0.01 MeV 以上的动能，才有足够的截面获得能量输出. 用加速器加速是不行的，因为将加速的氘核打在固体靶上，大部分能量消耗在同电子的碰撞上，能够发生聚变的约为百万分之一. 两束加速了的氘核对撞会由于多次库仑散射，累积的偏转可达 90°. 0.05 MeV 的氘核偏转 90°的截面约为 5×10^{-22} cm^{2}，而聚变反应截面只有 10^{-26} cm^{2}. 因散射偏转 90°的截面比聚变截面大 5×10^{4}

倍.因此两束加速氘核对撞的方法也不行.

研究表明,只有在高温等离子体中热核聚变才有可能.在氘核聚变反应中,用的是氘气的等离子体,氘核和电子都处在相同温度,两者碰撞不会造成能量损失,氘核和电子作无规热运动,互相不断碰撞,碰撞几率很高.高温等离子体是不能与容器接触的,因为一接触,容器可能熔化或蒸发.原子序数较高的元素掺入等离子体后,发生很强的韧致辐射耗散能量,使等离子体温度下降.

劳逊判据

氘核是带电的,由于库仑斥力,室温下的氘核不可能发生聚合反应.氘核要聚合在一起,首先必须克服库仑斥力.在核子间距小于 10 fm 时才会有核力的作用,那时的库仑势垒的高度为

$$E_C = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = \frac{1.44\ \text{fm}\cdot\text{MeV}}{10\ \text{fm}} = 144\ \text{keV}. \qquad (3.6.6)$$

两个氘核要聚合,首先必须克服这一势垒,每个氘核至少要有 72 keV 的动能,相当于要具有 5.6×10^8 K 高温.考虑到势垒贯穿和粒子的动能分布,理论估计聚变的温度 T 可降为 10 keV,约为 10^8 K,仍然是非常高的温度.这时所有的原子都完全电离,形成物质的第四态:等离子体.因此核聚变又称热核聚变.

除高温条件外,等离子体的密度 n 必须足够大,以保证氘核之间足够大的碰撞率.所要求的温度和密度必须维持足够长的约束时间 τ,保证温度和密度保持足够高.1957 年劳逊(J. D. Lawson)把这三个条件定量地写成

$$\begin{aligned} n\tau &= 10^{14}\ \text{s/cm}^3 = 10^{20}\ \text{s/m}^3, \\ T &= 10\ \text{keV}, \end{aligned} \qquad (3.6.7)$$

这就是著名的劳逊判据.

劳逊判据的考虑如下:要保持等离子体在足够高的温度,必须向等离子体提供足够的能量,即要对等离子体加热.加热的方式可以通过向等离子体发射高能中性粒子束,使电流流过等离子体加热.单位体积的加热功率 P_h 正比于等离子体的粒子密度 n:

$$P_h = C_h n, \qquad (3.6.8)$$

C_h 为常数.在等离子体中的热核聚变单位体积产生能量的功率为

P_f，正比于粒子数密度的平方 n^2，正比于约束时间 τ：

$$P_f = C_f n^2 \tau, \tag{3.6.9}$$

要使热核聚变有净的能量输出必须有

$$P_f > P_h, \tag{3.6.10}$$

因此

$$n\tau > C_h/C_f, \tag{3.6.11}$$

这就是劳逊判据. $P_f = P_h$ 的条件称为自持，这时输入和输出的能量相等. 图 3.6.1 显示了受控热核反应稳步逼近有尽能量输出(点火)目标的历程. 很多难以克服的工程问题有待解决，从受控热核聚变获得能量似乎还需要几十年.

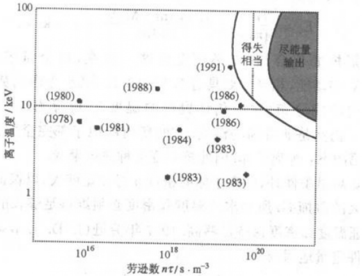


图 3.6.1 受控热核反应稳步逼近有尽能量输出(ignition)目标的历程. 右上角能量得失相当(breakeven)区的右上方为尽能量输出区

3.6.4 引力约束、惯性约束和磁约束

引力约束

在太阳内部，主要有两个循环反应：一个是碳循环，又称贝特(H. A. Bethe)循环，它是贝特在 1938 年提出来的. 贝特由于恒星能量的产生方面的理论研究获 1967 年诺贝尔物理学奖. 碳循环的反

应过程为

$$
\begin{aligned}
& p + {}^{12}C \to {}^{13}N, \\
& \quad {}^{13}N \to {}^{13}C + e^{+} + \nu, \\
& p + {}^{13}C \to {}^{14}N + \gamma, \\
& p + {}^{14}N \to {}^{15}O + \gamma, \\
& \quad {}^{15}O \to {}^{15}N + e^{+} + \nu, \\
& p + {}^{15}N \to {}^{12}O + \alpha + \gamma.
\end{aligned} \tag{3.6.12}
$$

在循环过程中,碳起催化剂作用,不增也不减.总的结果为

$$4p \to \alpha + 2e^{+} + 2\nu + 26.7\ \text{MeV}. \tag{3.6.13}$$

另一个是质子-质子循环,又称克里齐菲尔德(C. L. Critchfield)循环,反应过程为

$$
\begin{aligned}
& p + p \to D + e^{+} + \nu + 0.42\ \text{MeV}, \\
& e^{+} + e^{-} \to \gamma + \gamma + 1.02\ \text{MeV}, \\
& p + D \to {}^{3}He + \gamma + 5.49\ \text{MeV}, \\
& {}^{3}He + {}^{3}He \to \alpha + 2p + 12.86\ \text{MeV}.
\end{aligned} \tag{3.6.14}
$$

总的效果同样有:

$$4p \to \alpha + 2e^{+} + 2\nu + 26.7\ \text{MeV}. \tag{3.6.15}$$

当温度低于 1.8×10^{7} K 时,以质子-质子循环为主.太阳的中心温度只有 1.5×10^{7} K,在产生能量的机制中,质子-质子循环占 96%.在许多比较年轻的恒星内部,由于温度高于 1.8×10^{7} K,碳循环更重要.太阳每天燃烧 5×10^{10} kg 氢,转化为 α 粒子,释放的能量相当于每秒爆炸 900 亿颗百万吨级(4.2×10^{12} J)的氢弹.但是相对于太阳的总质量 2×10^{30} kg,还是一个小数.正是太阳巨大质量而产生的引力,把处于高温(10^{7} K)的等离子体约束在一起发生热核聚变反应.但是现在的温度低于克服库仑势垒所需的温度,聚变反应主要靠势垒贯穿实现.作为太阳的主要循环,质子-质子循环是非常缓慢的,其原因是两个质子反应形成氘核,必须发生 β^{+} 衰变,这是一个弱相互作用过程,此过程的反应截面为 10^{-23} b,几率很小.在太阳中一个碳原子通过碳循环所需的时间约为 6×10^{6} a,质子-质子循环的周期约为 3×10^{9} a.缓慢的反应速率使得太阳的质量在今后几百亿年

内不会有显著的变化.

惯性约束

氢弹从本质上讲是利用惯性力将高温等离子体进行动力性约束，简称惯性约束. 除裂变引爆的惯性约束外，还有激光惯性约束、电子束惯性约束和重离子束惯性约束方案等. 惯性约束是企图靠增大离子密度 n 来达到点火条件. 在氘的核聚变反应中，反应截面最大、释放能量最多的反应是

$$^{3}\mathrm{H} + {}^{2}\mathrm{H} \rightarrow \alpha + \mathrm{n} + 17.6\ \mathrm{MeV}. \qquad (3.6.16)$$

释放的能量有 4/5 为中子所得. 在氘的能量固定时，其反应截面比两个氘核大两个数量级. 氚在自然界中是不存在的，可由下列反应获得：

$$\mathrm{n} + {}^{6}\mathrm{Li} \rightarrow \alpha + {}^{3}\mathrm{H} + 4.9\ \mathrm{MeV}. \qquad (3.6.17)$$

因此，氘化锂(^{6}Li ^{2}H)可作为氢弹的原料. 氢弹的设计方案可以是：先让普通高效炸药引爆，使分散的裂变原料(^{235}U 和^{239}Pu)合并达到临界体积，发生链式反应，释放大量能量并产生高温高压，同时释放大量中子. 中子与^{6}Li 反应产生氚，氘和氚在高温高压下发生聚变反应，产生的 14 MeV 快中子能使廉价的^{238}U 裂变，因此常把^{238}U 与氘化锂混合在一起，导致裂变-聚变-裂变，整个过程在瞬间完成. 裂变的原子弹的当量一般为几万吨 TNT 当量，而氢弹中瞬间完成的裂变加聚变的反应可达百万吨，甚至千万吨 TNT 当量的量级. 如果设法使聚变的贡献大大超过裂变的贡献，产生的快中子数将大大增加，爆震、冲击波和热辐射等相应减少，这就是近年来发展的中子弹的基本原理.

激光惯性约束

氢弹中的聚变反应是不可控制的，多年来人们探索用人工控制的办法实现惯性约束. 激光约束是其中的一个方案：在一个直径约为 400 μm 的小球内充以 30～100 大气压的氘-氚混合气体，让强功率的激光(目前达到 10^{12} W，争取达到 10^{14} W)均匀地从四面八方照射小球，靶丸表面层因吸收激光束的能量而被熔化并向外喷射，高速喷射产生的反冲力使靶内氘氚混合气体迅速被压缩至高密度，温度

达到 10^8 K 而引起聚变反应. 激光"引爆"虽然和氢弹一样难以控制，但由于每次反应的热核物质很少，因而在能量利用上可以控制，没有危险. 但至今为止，惯性约束还没有一个成功的方案.

例题 3.6.2　普林斯顿的托卡马克聚变试验反应器的约束时间已达 400 ms，(1) 等离子体中粒子密度必须是多大才能满足劳逊判据？(2) 将此粒子密度与标准条件下理想气体的原子密度作比较. (3) 如果下一代的托卡马克达到点火条件，等离子体的温度为 10 keV，约束时间为 1 s，则相应的等离子体中粒子的密度应为多少？

解　(1) 按照劳逊判据：

$$n\tau = 10^{20}\ \mathrm{s/m^3},\quad \tau = 400\ \mathrm{ms},\quad n = 2.5\times10^{20}\ \mathrm{m^{-3}},$$

约束时间为 400 ms，等离子体中粒子密度必须是 $2.5\times10^{20}\ \mathrm{m^{-3}}$ 才能满足劳逊判据.

(2) 这个原子数密度在标准条件和在理想气体中由下式给出：$n'=N_A/V_m$，这里 $N_A=6.02\times10^{23}$ 为阿伏伽德罗常数，$V_m=2.24\times10^{-2}\ \mathrm{m^3/mol}$ 为标准条件下理想气体的摩尔体积. 因此：$n'=2.7\times10^{25}\ \mathrm{m^{-3}}$.

我们在上面得到的粒子数密度，比标准体积下理想气体的粒子数密度小 10^5.

(3) 在劳逊判据图上，10 keV 温度的水平线延伸到点火区，对应的劳逊数 $n\tau=10^{21}\ \mathrm{s/m^3}$，约束时间为 1 s，相应的等离子体中粒子密度必须是 $1\times10^{21}\ \mathrm{m^{-3}}$ 才能满足劳逊判据.

例题 3.6.3　假定在激光引发的惯性约束聚变中使用的燃料小球是由相等数目的氘和氚的液态混合物做成. 这种燃料球的密度为 $200\ \mathrm{kg/m^3}$，在激光脉冲的作用下密度增大 10^3 倍，求(1) 压缩态氘或氚的粒子密度；(2) 根据劳逊判据，约束时间至少多长？

解　(1) 压缩态的密度为

$$d' = 10^3 d = m_D\frac{n}{2} + m_T\frac{n}{2},$$

其中 n 为在压缩球中单位体积中氘或氚的粒子数. m_D 和 m_T 是氘和氚的原子量. 用相应的摩尔质量 M_D、M_T 和阿伏伽德罗常数 N_A 表示

得

$$m_D = \frac{M_D}{N_A}, \quad m_T = \frac{M_T}{N_A},$$

因此氘或氚的粒子密度 n 为

$$n = \frac{2d' N_A}{M_D + M_T} = \frac{2 \times 10^5 \times 6.02 \times 10^{23}}{(2.0 + 3.0) \times 10^{-3}} \mathrm{m}^{-3} = 4.8 \times 10^{31}\ \mathrm{m}^{-3}.$$

(2) 根据劳逊判据，约束时间至少为

$$\tau > \frac{10^{20}\ \mathrm{s \cdot m^{-3}}}{n} = 2 \times 10^{-12}\ \mathrm{s}.$$

磁约束

在磁约束实验中，等离子体在磁场中受洛伦兹力的作用绕磁力线运动，约束在与磁力线垂直的平面内，同时等离子体被电磁场加热. 由于目前的技术水平还不可能使磁感应强度超过 10 T，因此磁约束的高温等离子体非常稀薄. 如果惯性约束是企图靠增大离子密度 n 来达到点火条件，磁约束则是靠增大约束时间 τ. 磁约束的种类很多，其中最有希望的可能是环流器. 又称托卡马克(Tokamak). 如图3.6.2所示. 环流器主机的环向场线圈会产生几万高斯的沿环形

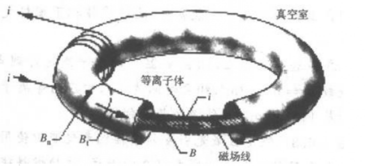


图 3.6.2　托卡马克(Tokamak)的环形电流室. 注意螺旋形磁场 B

管轴线的环向磁场 B_t(toroidal field)，由铁芯(或空芯)变压器在环形真空室中感生等离子体电流. 环形等离子体电流就是变压器的单匝次级，这个电流将产生角向磁场 B_n(poloidal field). 环向磁场 B_t 和角向磁场 B_n 叠加为螺旋形磁场 B. 由于感生的等离子体电流会产生大量的焦耳热，因此这个磁场又称为加热场.

根据磁流体力学的理论，在不弯曲的磁场中，等离子体的压强 P

和磁通密度 B 满足下列关系：

$$P+\frac{B^2}{2\mu_0}=\text{常数}, \tag{3.6.18}$$

μ_0 为真空磁导率. 当等离子体受约束时，在它的外面，压强为零，上式可以写成：

$$P_{\text{in}}+\frac{B_{\text{in}}^2}{2\mu_0}=\frac{B_{\text{out}}^2}{2\mu_0}. \tag{3.6.19}$$

要实现等离子体约束，B_{out}必须大于 B_{in}. 如果 $B_{\text{out}}=2\ \text{T}$，$B_{\text{in}}=0$，可以算得 $P_{\text{in}}=15$ 大气压. 可见磁场可以产生很大的约束力. 美国普林斯顿实验室的最大装置 TFTR 离子温度已达 20 keV，约束时间已为 170 ns，$n\tau T$ 已达 $5\times10^{20}\ \text{m}^{-3}\cdot\text{s}\cdot\text{keV}$. 已接近劳逊判据.

3.6.5 核聚变研究

20 世纪 50 年代初，美国、英国和前苏联在研制核武器的同时，也在从事受控热核聚变的工作①. 美国在 Livermore 进行磁镜 (magnetic mirrors) 研究，在 Los Alamos 进行环形箍缩 (θ-pinch) 研究，在普林斯顿进行仿星器 (Stellarator) 研究，这就是“希伍德计划” (Sherwood Project)②. 英国的哈威尔核研究中心则从事 Z-pinch 的研究 (Zeta)，前苏联在库尔恰托夫和阿尔奇摩维奇领导下进行 Z-pinch 和托卡马克 (有极放电和无极环形放电) 的研究. 直到 20 世纪 60 年代后期前苏联科学家在 T3 托卡马克上利用强纵场克服，在等离子体的宏观稳定性上才取得突破性的进展，等离子体的各项参数有很大提高：等离子体温度 T_i，$T_e\approx0.8$ keV、等离子体密度 $N_i\approx3\times10^{13}\ \text{cm}^{-3}$ 和能量约束时间 $\tau_e\approx20$ ms. 磁镜一直为其“终端”损失困扰；而 θ-pinch 的最大装置“希拉克”因未能克服宏观稳定性而全盘失败，相比较之下，其他途径进展不大，而托卡马克脱颖而出. 从 1970 年起世界上掀起一股“托卡马克”热，美国普林斯顿大学的等离子体物理研究所 (PPPL)把 Stellarator C 装置改成托卡马克，称之

① 邱励俭，核科学与工程 **21** (2001) 29.

② Bishop A. S., Project Sherwood, the U. S. Program in Controlled Fusion. Addison Wesley. Reading. MA, 1958.

为 ST，得到了前苏联 T3 上的实验结果. 70 年代初期在 PPPL 同时造了三个托卡马克：ATC (Adiabatic Toroidal Compressor)，PDX (Poloidal Divertor Experiment)和 PLT (Princeton Large Torus)，而停止了原来的"仿星器"研究. 1976 年在美苏倡议下，在 IAEA 的框架下，由美国、欧洲、日本及前苏联共同建造 ITER(International Tokamak Experimental Reactor). 1990～2000 年在美国宣布退出 ITER 后，其他伙伴国又提出 ITER 的改进设计 ITER FEAT，在价格降低一半的基础上，能进行氘氚等离子体"燃烧"的物理实验，部分的工程可行性已得到验证，至于如何组织建造以及在哪里建造还在讨论之中.

就托卡马克途径来说，还必须通过氘氚等离子体的自持"燃烧"实验，才能完成"科学可行性"的验证. 实现第一代核聚变装置"自持燃烧"及"稳态运行"，还必须解决许多关键的物理和技术问题. 只有在解决了这些问题的基础上才能发展实验堆和商用原型堆（第二代），最后，才能说"商业化应用"(第三代). 有人估计聚变商用化(托卡马克途径)大约在 2050 年后实现.

聚变反应是富中子、贫能量(14 MeV/次)，而裂变反应恰好是贫中子、富能量 (200 MeV/次)，如果把聚变作为 14 MeV 中子发生器(驱动器)，利用氘氚聚变产生的 14 MeV 的中子进入到一个叫包层的次临界装置，如安排得当，在这个包层里，可免除铀(U)的浓缩和钚(Pu)的分离，直接利用天然铀(U)和钍(Th)作燃料. 这种装置就可同时具有下列四项功能：(1)生产核燃料，供给裂变堆核电站用；(2)处理核废料，"烧尽"裂变堆电站乏燃料中的高放核废料；(3)生产氚，一方面维持堆芯聚变反应所需的氚，另一方面补充其他用途消耗的氚 (氚的自然半衰期约为 12 年)；(4)增值能量，以供热或发电. 把这种聚变堆与裂变堆结合起来的装置就是聚变-裂变混合堆.

早在 20 世纪 50 年代初就有人提出过聚变-裂变混合堆，而认真研究是在 20 世纪 70 年代由美国和前苏联各自进行，直到 1976 年他们开始举行联合讨论会. 当时这种研究的目的就是生产 Pu. 美国在 20 世纪 80 年代曾研究过利用混合堆生产现存大量核武器所需补充的氚. 美国在 1998 年把聚变中子源作为聚变能的近期利用，聚变中

子源研究的范围是:燃烧核废料、生产核燃料、产氚等. 中国正在进行聚变-裂变混合堆的研究①.

习　题

3.6.1　煤的燃烧值为 2.9×10^7 J/kg, 1 kg 铀在反应堆中释放出的能量为 8.2×10^{13} J. 获得 10^9 J 的能量分别需要多少煤或铀?

3.6.2　普通水中大约含有 0.015%质量的重水. 在重水分子中, 有一个氢原子被氘取代. 如果一升普通水中的氘在一天内通过 $^2H+^2H\rightarrow{}^3_2H+n+3.27$ MeV聚变反应烧完, 求其聚变功率.

3.6.3　估算两个氘核聚合成 ^4He 放出的能量, 以及 1 克 ^2H 全部聚合放出的能量. 一个 10^7 kW 的聚变堆每秒聚变的氘核数是多少? 一年要消耗多少千克的氘? 设效率为 80%.

3.6.4　计算 ^{98}Mo 裂变成两个相等部分的衰变能 Q. 所需的质量: ^{98}Mo 为 97.905 406 u; ^{49}Sc 为 48.950 022 u. 如果 Q 是正值, 讨论为什么这个过程不能自发地发生.

3.6.5　^{238}Np 裂变时有一 4.2 MeV 的势垒, 从这个原子核中取走一个中子需要 5.0 MeV 的能量. ^{237}Np 能否在吸收一个热中子后发生裂变?

3.6.6　(1) 一个初始动能为 K, 质量为 m_n 的中子和一个质量为 m 的静止原子对头碰撞, 证明中子的能量损失 ΔK 为

$$\frac{\Delta K}{K}=\frac{4m_nm}{(m+m_n)^2}.$$

(2) 对氢、氘、碳和铅计算 $\Delta K/K$.

(3) 如果中子的初始动能 $K=1.00$ MeV, 通常以氘作为减速剂, 多少次这样的碰撞才能使中子变成能量为 0.025 eV 的热中子? (在实际的减速剂中, 大部分碰撞不是对头的)

① QIU L. J. et al., Nuclear Fusion, 40 (2000) 629.

第四章　粒子物理

如果物质在它的内部没有其他种类的粒子，并且无法将其再分为更小的部分，我们将把这物质称为基本粒子. 基本粒子物理学是研究能量、空间、时间等物质的基本属性的科学，它的任务是探索物质的基本组元和支配这些组元性质的力. 和所有物理学家一样，基本粒子物理学家也探索确定我们周围物质世界的统一的原理和物理定律. ①

20 世纪以来，物理学在探索物质微观结构基本规律方面不断地取得进展，从 20 世纪初到 30 年代探索物质微观结构的前沿学科是原子物理学，30 年代到 40 年代是原子核物理学，50 年代到 90 年代是粒子物理学. 这三个学科反映了物质微观结构的不同层次和微观粒子能量变化的尺度有关：原子物理学的能量变化尺度是 eV，原子核物理学的能量变化尺度是 MeV (10^6 MeV)，粒子物理学的能量变化尺度是 GeV (10^9 eV)，目前粒子物理学中能量变化已接近 TeV (10^{12} eV). 因此经常将粒子物理称为高能物理. 粒子物理学有几个显著的特点：(1) 所有的粒子都是微观尺度的客体，都具有量子性；(2) 粒子运动时，速度的变化常达到可以和光速相比拟的量级，运动是相对论性的；(3) 粒子运动时，常表现出粒子之间的相互转化，粒子数目是可变的，根据狭义相对论的质能公式，正反粒子湮灭为光子时，全部的静质量都转换为能量，能量的变化达 GeV 以上；(4) 处理粒子物理的理论基础是量子场论，在量子场论的总框架下，量子电动力学、电弱统一理论和量子色动力学为研究电磁相互作用、弱相互作用和强相互作用提供了成功的理论.

---

① 沈齐兴、王平、毛慧顺译，[美]基本粒子物理专门小组等编著，基本粒子物理学，科学出版社，1992.

4.1 粒子加速器

物理学是一门实验科学.只有实验和观测才能告诉我们,哪些想法是正确的,哪些想法是错误的.当实验上取得一批新的实验数据时,理论就要被这些数据检验.研究粒子的产生、衰变和湮灭等转化现象常常需要有高能粒子进行碰撞,要产生一个质量为 m 的新粒子,所需的能量至少为 mc^2;同样探索粒子的细致结构也需要高能,为了观测线度 d 的结构细部,所用的波长必须可以与 d 相比,或小于 d,这就要求粒子的动量大于$\hbar/d$,为了研究 1 fm 数量级线度所需的能量大约是 20 MeV.这些高能粒子是由宇宙射线和高能粒子加速器提供的.宇宙射线中存在能量高达 10^{21} eV 的高能粒子,但是这样的高能粒子在宇宙射线中数目很少,往往要等待很多年,才能获得所需的高能粒子,而实验又很难重复.目前加速器提供的高能质子束的能量可达 10^{12} eV.因此在 10^{12} eV 能量以下的高能粒子可由加速器获得,高于此能量的高能粒子还只能利用宇宙射线.

粒子加速器通常加速带电粒子,分为电子、质子和重离子加速器,其基本原理是带电粒子在静电场或高频电场中被电场力加速.为了使带电粒子在一个环形轨道上被多次加速,需要用磁场偏转带电粒子的运动方向.为了避免加速粒子被空气分子碰撞而损失能量,加速粒子通道应保持超高真空.

4.1.1 高压倍加器

1932 年,考克拉夫(J. D. Cockcroft)和瓦耳顿(E. T. S. Walton)发明了高压倍加器.高压倍加器原理如图 4.1.1 所示.可以将质子加速到 1 MeV 以下.考克拉夫和瓦耳顿由此获得了 1951 年诺贝尔物理学奖.

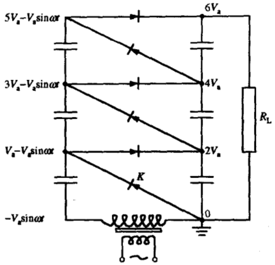


图 4.1.1 高压倍加器原理图

4.1.2 静电加速器

用变压器和整流器相配合直接得到很高的电压是困难的.在范德格拉夫加速器[①]中,问题是通过将电荷 Q 传递给电容器 C 的头部而解决的.用所得到的电压 $V=Q/C$ 来加速带电粒子.范德格拉夫静电加速器主要部件如图 4.1.2 所示.

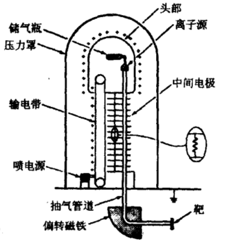


图 4.1.2 范德格拉夫静电加速器原理图

用 20～30 kV 左右的电压将正电荷喷到绝缘带上,它由马达带动将电荷送到头部,那里有一组针将电荷刮掉并输送到半球

① R. J. Van de Graaff, *Phys. Rev.* **38** (1931) 1919A; R. J. Van de Graaff, J. G. Trump, and W. W. Buechner, *Rept. Progr. Phys.* **11** (1948) 1.

形头部的表面. 在离子源中产生正离子(质子或氘核等),在抽真空的加速管中加速,从加速管中出来的粒子束通常由一个磁铁偏转到靶上. 如果将整个系统放在空气中,则在头部人为的闪光放电前,电压大约能达到几 MV,如果将整个系统放在一个高压罩内,罩内充满不活泼的气体,例如 15 个大气压的氮和二氧化碳,则获得的电压可达 12 MV.

串列式静电加速器先加速 H^- 离子,到加速器中部正高压端,H^- 离子经过一层薄膜,将所带的两个电子剥去,余下的质子被反向高压加速,因此能得到一般静电加速器两倍的能量.

在市场上可以买到各种能量和不同价格的范德格拉夫静电加速器,它们的束流强度大,高达 100 μA,而且可以连续;准直性能好,输出能量稳定(±10 keV). 它们是研究原子核结构的通用工具. 对质子来说,最大的能量还局限在 30～40 MeV,因此不能用于基本粒子的研究.

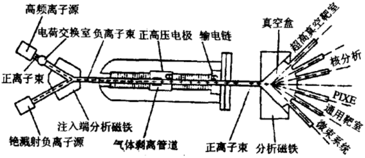


图 4.1.3　串列式静电加速器原理图

4.1.3　直线加速器

为了达到很高的能量,必须对粒子反复多次加速. 最简单的系统就是如图 4.1.4 所示的直线加速器①. 一系列的圆形金属筒接到高频振荡器上,使相邻的金属圆筒极性相反. 圆筒内部没有电场. 在两个金属圆筒之间的缝隙处,电场方向根据高频振荡器变化,粒子束沿

① R. Widerröe, *Arch. Elektrotech.* 21 (1928) 387; D. H. Sloan and E. O. Lawrence, *Phys. Rev.* **38** (1931) 2021.

金属圆筒的中心轴注入，设计粒子束通过第一个缝隙时恰好该处的电场是加速粒子的方向，高频电压的极大值为 V_0，带电粒子获得的能量为 qV_0，第二个金属圆筒的长度设计为 $L_1=v_1T/2$，其中 v_1 为经过第一次加速后粒子的速度，T 为高频振荡的周期. 这样当粒子到达第二个缝隙时，电场方向已经改变，高频电压又正好处于加速粒子的方向. 两次加速使粒子共获得能量 $2qV_0$. 如此继续下去，粒子被反复加速，速度不断提高，金属圆筒的长度不断增加，粒子在金属圆筒中匀速运动，没有辐射效应，粒子速度可接近光速. 此时，金属圆筒的长度为 $L=cT/2$.

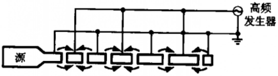


图 4.1.4　直线加速器原理图. 在漂移管间隙处，箭头表示一定时间下电场的方向

最大的电子直线加速器在美国加州斯坦福直线加速器中心(SLAC)，其能量可达 22 GeV，长度达 3 km. 在洛斯阿拉莫斯(Los Alamos)有一个束流为 1 mA，能量为 800 MeV 的质子直线加速器，即所谓介子工厂. 最初几级见图 4.1.5.

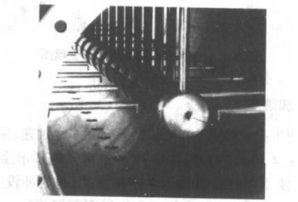


图 4.1.5　洛斯阿拉莫斯(Los Alamos)质子直线加速器中的最初几级①

① Hans Frauenfelder, Ernest M. Henley, Subatomic physics, 2nd Edition, Prentice Hall/Englewood Cliffs, New Jersey 07632, 1991, p16.

4.1.4 回旋加速器

斯坦福 22 GeV 直线加速器已经长达 3 km 了，一台 500 GeV 的直线加速器就要长达 75 km. 因此很难解决其结构和功率问题. 如果让粒子围绕一个比较小的轨道兜圈子，实验室长度将大大缩短. 1930 年劳伦斯提出了第一个环形加速器——回旋加速器①，其基本原理在电磁学中已经学过，这里不再叙述. 由于辐射效应，回旋加速器能将质子加速到 20 MeV，其实验装置图见图 4.1.6 和图 4.1.7.

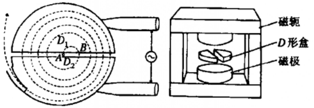


图 4.1.6　回旋加速器原理图

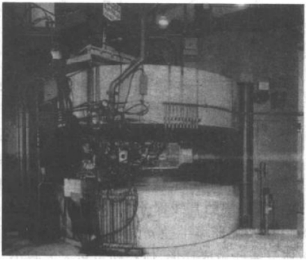


图 4.1.7　美国阿贡国家实验室回旋加速器，顶端和底部的圆柱体是磁体，离开加速器的粒子束和空气分子碰撞后是可见的②

① E. O. Lowrence and N. E. Edlefsen, *Science* **72** (1930) 376; E. O. Lowrenceand M. S. Livingston, *Phys. Rev.* **40** (1932) 19.

② Kenneth Krane, Modern Physics, John Wiley & Sons, New York (1983) p266.

4.1.5 同步加速器

在回旋加速器中，随着粒子能量的提高，其轨道半径不断增加，粒子运动轨迹是逐渐扩大的螺旋线，这时粒子运动的周期将加长，在粒子到达加速缝隙时，高频电压的峰值已经过去，粒子得不到最大加速，甚至会落后到反向电压而被减速．由于粒子的运动周期和高频电场不能同步，粒子的加速能量受到限制．一般质子只能被加速到25 MeV 以下．回旋加速器还有一个问题，由于偏转磁场遍布整个回旋加速器，磁极是圆柱形实心体，磁体十分笨重．为了克服这些困难，1945 年威克斯勒(V. Veksler)和麦克米仑(E. M. McMillan)①先后提出了同步加速器原理．其基本部件如图4.1.8所示．注入器将初

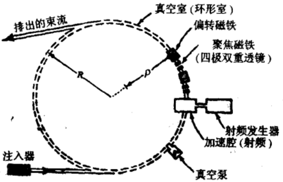


图 4.1.8 同步加速器原理图

始能量为 E_i 的粒子注入到环中．曲率半径为 ρ 的偶极磁铁使粒子绕着圆环弯转，而四极系统使之保持准直．粒子在以圆频率为 ω 供给能量的若干射频腔内得到加速．粒子的真正路径是由在加速腔中、聚焦部件中和其他部件中的直线部分和弯曲磁铁中的环状部分组成的，因此环的半径 R 比曲率半径 ρ 大．让粒子在半径恒定的轨道上加速，这样磁体只需要做成环形，体积和重量大大减小．为了保持粒子的轨道半径为常数，可以使磁感应强度 B 随时间相应增加．这种具有固定轨道，用控制磁场的方法实现电场对粒子同步加速的加速

① V. Veksler, *J. Phys.* (USSR) **9** (1945)153; E. M. McMillan, *Phys. Rev.* **68** (1945) 143.

器称为同步加速器.同步加速器往往在轨道的某些地点安装一些类似直线加速器中的金属圆筒式的加速电极,用微波激励加速.

粒子不能在一个环中从开始加速到最后的能量.否则射频频率和磁场的变化范围就太大了.因此粒子要先在比较小的加速器中预加速,然后再注入到大加速器中.

例如美国费米国家加速器实验室①(FNAL)的 1 TeV 质子同步加速器:一台高压倍加器(考克拉夫-瓦耳顿)产生 750 keV 的质子束,然后由直线加速器将其能量提高到 200 MeV;接着由一台作为增强器的同步加速器接收前一级来的粒子,并将能量提高到 8 GeV,然后才开动大同步加速器,将质子能量提高到 300 GeV.布鲁克海文国家实验室的 30 GeV 的 AGS 也可以产生 1 TeV 的能量.欧洲核子中心(CERN)有类似的质子同步加速器 PS 和超级质子同步加速器 SPS.

4.1.6 对撞机

当静止质量为 M 的粒子具有的能量 E 很高时,其运动必须考虑相对论效应.用它轰击静止靶核时,质心系相互作用有效能量 E^* 与 $E^{1/2}$ 成正比:

$$E^* = (2Mc^2E)^{1/2}, \tag{4.1.1}$$

相当大的一部分能量变成质心运动的动能,与粒子间的相互作用无关.比如一台 20 TeV 的质子加速器,如果用加速的质子轰击静止的氢靶,质子之间相互作用的有效能量仅为 200 GeV,利用效率仅为 1%. 1956 年克斯特(D. W. Kerst)和他的同事们以及奥尼尔(G. K. O'Neill)②提出用对撞束以获得非常高的有效能量.能使高能粒子发生对头碰撞的加速器称为对撞机.两个 21.6 GeV 的质子束对头碰撞,其作用可以相当于 1000 GeV 的加速器.能量相同、运动方向相反的两束粒子对撞,质心系的速度为零,动能为零,粒子的全部

① Hans Frauenfelder, Ernest M. Henley, Subatomic physics, 2nd Edition, Prentice Hall/Englewood Cliffs, New Jersey 07632, 1991, p20.

② D. W. Kerst *et al.*, *Phys. Rev.* **102** (1956) 690; G. K. O'Neill, *Phys. Rev.* **102** (1956) 1418.

能量都是粒子间相互作用的有效能量.对撞机的主要技术障碍是它们束流的强度,两个束流都必须比普通加速器中可利用的束流强得多,以便在对撞区内产生足够多的事例.

欧洲核子中心的质子储存环(简称 ISR)就是2×28 GeV 质子对撞机,环形加速器将 28 GeV 质子束沿切线方向送入"调度站",经偏转磁铁将高能质子送入两股叉道,这两束 28 GeV 的质子束在几个交叉点上发生对撞.欧洲核子中心巨大的质子-反质子(SPS)对撞机可提供 600 GeV 的质心系能量,这是在 SPS 机器的主环中贮存沿互相相反方向的质子与反质子束来实现的. 这项设施提供的条件导致了 1982～1983 年间 $W^{\pm}$和 Z^{0} 粒子的发现,这是期待已久的弱相互作用中间玻色子.美国 Cornell 大学 1979 年建成 2×8 GeV 的正负电子对撞机 CESR,美国 SLAC 实验室 1980 年建成 2×18 GeV 的正负电子对撞机SPEAR,1986年美国SLAC实验室建成2×50GeV



图 4.1.9 在瑞士日内瓦附近欧洲核子中心(CERN)全景图.27 公里周长的大圆圈的隧道包括 50 GeV 的加速器,电子和正电子沿相反方向运动对撞.小圆圈为一类似的质子和反质子对撞机.①

① Arthur Beiser, Concept of Modern Physics, 5th Ed., McGraw-Hill, Inc. New York (1995) p474.

的正负电子对撞机，美国 FNAL 实验室 1986 年建成了 2×1000 GeV 的正负质子对撞机，得到的总能量为 2 TeV，同样重要的是，它的亮度达到 $3\times10^{30}/(\text{cm}^2\cdot\text{s})$. 1988 年我国高能所建成 2×2.8 GeV 的正负电子对撞机.

欧洲核子中心 1988 年建成了 2×(50—120) GeV 的正负电子对撞机，机器周长 27 公里(见图 4.1.9). 现在已有近 20 台正负粒子对撞机在运转.

习　题

4.1.1 回旋加速器和同步加速器之间的本质区别是什么？是哪些因素限制了这两种加速器的能量无限增加？试作一些定量说明.

4.1.2 试说明直线加速器的基本原理. 与圆形加速器比较，它有哪些优缺点？

4.1.3 为什么近年来建造的加速器主要是对撞机，与固定靶加速器比较，对撞机的优缺点是什么？它能完全代替固定靶加速器吗？

4.2 粒子探测器

在高能粒子物理实验中高能粒子束打到静止靶核上，或者两高能粒子束对撞，必须在极短的时间内(μs 到 ps)，用高能粒子探测器测量相互作用前后所有初、次级粒子的类型、数目、角分布和动量分布等参数，研究粒子的性质、结构或相互作用的特点和规律. 高能粒子探测器主要有径迹探测器和电子学探测器两种类型. 20 世纪 70 年代以前高能物理实验主要是利用径迹探测器进行的. 其优点是直观、作用顶点可见、有 4π 立体角的接收度、多粒子效率好和测量精度高等. 其缺点为收集和分析整理数据的速度太慢、体积不容易作得很大，因此很难适应能量越来越高、测量截面越来越小和事例率大的实验要求. 电子学探测器的优点有每秒能接收 10^7 个束流粒子，灵敏体积可达数十立方米，空间分辨率达十几微米，可同时记录十几根径迹，等等. 现在通常将径迹探测器和电子学探测器配合使用，组成混

合谱仪,径迹探测器主要作为顶点探测器.

4.2.1 径迹探测器

通常使用的径迹探测器有原子核乳胶、威耳逊云室、气泡室和固体径迹探测器.

原子核乳胶

核乳胶类似于普通照相底片乳胶,射线在乳胶层中运动的路径上产生电离,经显影、定影可得粒子的径迹图象,根据径迹的长短和粗细就可以鉴定粒子的种类和能量. 1947 年鲍威尔(C. F. Powell)用乳胶研究宇宙射线,终于发现了汤川秀树预言的 π 介子. 鲍威尔因发展核乳胶获得了 1950 年诺贝尔物理学奖.

威耳逊云室

1897 年威耳逊(C. T. Wilson)发明用云室观测高能粒子的径迹,云室里充满水和酒精的饱和蒸汽. 入射的高能带电粒子会在云室里产生大量的正负离子对,同时放出大量的热能,水蒸汽突然绝热膨胀,云室的温度突然下降,饱和蒸汽变成过饱和蒸汽. 这些离子成为凝聚中心,在粒子经过的路径上形成大量的雾滴,显示出粒子的径迹,就可用闪光照相拍摄粒子径迹的照片. 威耳逊为此获得了 1927 年诺贝尔物理学奖. 图 4.2.1 为安德森(C. D. Anderson)发现正电子的云室照片. 在云室中加磁场使带电粒子在垂直于磁场方向上偏转而作曲线运动,由此曲线的曲率半径和磁感应强度可以推算出带电粒子的动量. 图中磁场方向指向图里,带电粒子的径迹向左弯曲,它只能带正电荷. 图中中央的暗带为云室中加的铅板,当带电粒子通过铅板后,能量和动量都要降低,由带电粒子通过铅板前后的运动轨道的曲率半



图 4.2.1 发现正电子的云室照片

径不同，能给鉴别粒子提供更多的信息.

气泡室

气泡室是尽可能全面观察全部物理过程的探测器. 自从格雷塞尔(D. A. Glaser)1952 年发明气泡室以来，它在研究亚原子特性方面起了决定性的作用①. 格雷塞尔对气泡室所依据的物理现象作了最好的说明："气泡室是一个装满透明液体的容器，液体高度过热，使得电离粒子通过液体时，由于沿着粒子的路径开始生长一连串的气泡而引起激烈的沸腾". 格雷塞尔②因发明气泡室获得了 1960 年诺贝尔物理学奖.

过热液体是处在这样一种温度和压力下，这时实际加在液体上的压力比液体在该稳定下的平衡蒸气压低. 这种状态是不稳定的，单个带电粒子通过，就会形成气泡. 气泡室类似一个带有活塞的气缸，如图 4.2.2 左图所示. 实验时，气缸中的液体先是保持在平衡蒸气压下，通过活塞的运动使压力迅速下降，以达到过热状态，气泡室处于灵敏状态几毫秒以后，过程翻转，活塞向相反方向运动，于是气泡室的压力又恢复到平衡值. 气泡室的灵敏时间和来自加速器的粒子脉冲到达气泡室灵敏体积的时间是同步的. 用电子闪光照明这些气泡并用立体照相记录下来. 1971 年 11 月 13 日在美国阿贡国家实验室的 3.6 m 的氢气泡室中观测到了第一个中微子的相互作用. 这个气泡室是目前最大的一个，它盛有大约 20 000 升液氢，在气泡室的 25 m^3 的体积内由一个超导磁体产生大约 1.8 T 的磁场. 图 4.2.2 右图为美国阿贡国家实验室的 3.6 m 的氢气泡室.

格雷塞尔的第一个气泡室仅容纳几个立方厘米的液体，后来迅速发展，不到 20 年，气泡室的容积已经增长了一百万倍以上. 为了使带电粒子偏转，还需要巨大的磁铁，通常使用超导磁体. 过热液体通常是氢，一旦与氧接触就要发生爆炸. 因此必须有严格的安全制度. 欧洲核子中心有 3.7 米的液氢气泡室，使用了超导磁体. 美国 BNL 实验室有 80 英寸的液氢气泡室，1964 年在此气泡室中发现了 Ω^-超

---

① L. W. Alvarez, *Science* **165** (1969) 1071.

② D. A. Glaser and D. C. Rahm, *Phys. Rev.* **97** (1955) 474.

子.图 4.2.3 是发现 Ω^- 超子的液氢气泡室的照片.

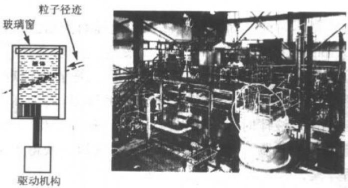


图 4.2.2　左图为气泡室原理图,右图为美国阿贡国家实验室的 3.6 m 的氢气泡室

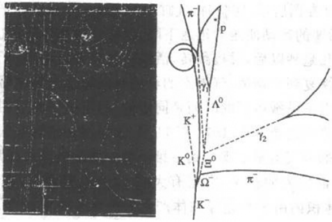


图 4.2.3　发现 Ω^- 超子的液氢气泡室的照片

固体径迹探测器

固体径迹探测器是一块晶体,当重带电粒子射入此固体材料后,在粒子穿过的路径上会产生辐射损伤,造成晶格结构的破坏、分子链的断裂,或原子的移位.观测晶体中的缺陷就可以获得粒子的径迹.1992 年我国物理学家唐孝威等研制成功的 MoS_2 固体径迹探测器,其空间分辨率已达到纳米量级.可以用扫描隧道显微镜对粒子造成的辐射损伤直接进行观测.

4.2.2 电子学探测器

电子学探测器主要有气体探测器、闪烁探测器以及半导体探测器.

气体探测器

高能带电粒子通过惰性气体和有机气体的混合物时,在其通过的路径周围生成大量的正负离子对. 气体中产生一对离子平均所需的能量 ω 称为平均电离能. 高能离子在气体中产生的总电离离子对数与入射离子的能量 E 成正比:

$$N = E/\omega. \tag{4.2.1}$$

在气体探测器中安装圆筒状阴极和位于轴线的丝状阳极. 在阳极和阴极之间加上高压,电离产生的正离子和电子被强电场加速,并和气体分子碰撞引起次级电离. 外加电压合适时,阳极丝附近可能出现次级电子的雪崩产生过程. 雪崩电子很快被阳极收集,剩下的正离子向阴极移动,在接地的阳极上感应出负脉冲,通过电子线路加以记录. 这就是正比计数管和盖革计数管的基本原理.

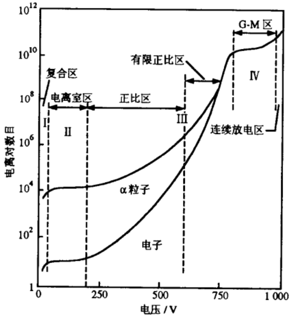


图 4.2.4 气体探测器工作区与外加电压的关系

正比计数管

当两次碰撞之间电子获得的动能大于气体分子的平均电离能时，就会发生次级电离，电场越强，电离几率越大．这种电离过程不断增殖的过程就是电子雪崩．最后阳极和阴极收集到的电荷数 AN 比初始电离数 N 大了 A 倍．A 称为气体放大倍数．按照气体放大倍数和外加电压的关系将气体探测器分成若干工作区域．如图 4.2.4 所示．在电离室工作区，外加电压较小，电离的离子在加速过程中获得的能量不足以引起气体分子的进一步电离，于是在阳极上收集到的仅是入射粒子的原始电离电荷．利用正比区特性制成的正比计数管气体放大倍数 A 可达 10^2～10^4，阳极上得到的脉冲电压与入射粒子的能量成正比．它主要用来测量入射粒子的能谱．图 4.2.5 为正比计数管示意图．

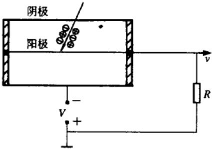


图 4.2.5　正比计数管示意图

多丝正比室

正比计数管只能确定粒子的能量，不能确定粒子的运动径迹，因为它只有一根阳极丝．物理学家很快就开始研制多根阳极丝的正比计数器．但是在研制初期，曾错误地认为距带电粒子最近的阳极丝上产生脉冲信号时，邻近的阳极丝上会产生同极性的脉冲信号（图 4.2.6 中虚线所示），因此很难确定粒子的位置．夏帕克（G. Charpak）提出了完全不同的看法．对于图4.2.6 所示的多丝结构，电离产生的电子运动到阳极丝附近的强电场区时，会发生电子雪崩，形成自持放电，在距入射粒子最近的阳极丝上形成幅度最大的负脉冲，而邻近的阳极感应产生的脉冲为正极性，只要将阳极丝与只对负脉冲信号灵敏的放大器连接，就可以排除感应正脉冲的影响．实验证实

了这一分析. 1968 年夏帕克终于研制成功了多根阳极丝的正比计数器——多丝正比室. 1974 年丁肇中和里希特(B. Richter)发现 J/ψ 粒子, 1982 年鲁比亚(C. Rubbia)和范德米尔(S. Van der Meer)发现中间玻色子 W^+、W^- 和 Z^0 都使用了多丝正比室. 1992 年夏帕克获得了诺贝尔物理学奖.

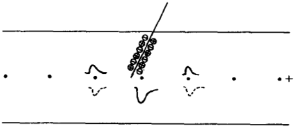


图 4.2.6 多丝正比室原理图

G-M 计数管

当计数管中的电场强度强到使气体放大倍数 $A>10^8$, 电子雪崩会发展成自激放电. 此时增殖的离子对总数已经与原始电离无关. 工作于 G-M 区域的计数管是盖革(Geiger)和米勒(Müller)发明的. 称为 G-M 计数管.

由于一旦有入射粒子, 计数管就会自激放电, 为了达到计数的目的, 必须设法在一次放电后迅速终止. 通常有两种方法, 一种是选择较大的外接电阻, 一旦放电, 使两个电极之间的电压迅速下降, 电场减弱, 自激放电终止. 另一种是在工作的惰性气体中掺有有机气体或卤素气体(F_2, Cl_2), 后者能大量吸收自激放电过程中产生的能量而使放电终止. G-M 计数管灵敏度高, 输出脉冲幅度大, 制作成本低, 使用方便.

闪烁探测器

闪烁探测器由闪烁体、光电倍增管和相应的电子仪器组成. 如图 4.2.7 所示. 入射粒子进入左边的闪烁体时, 使闪烁体分子电离和激发, 退激发时发出大量光子. 在闪烁体表面涂有反光物质, 光子集中向右边的光电倍增管射去. 光电倍增管的作用是使光子转化成光电子, 并使电子数增殖, 大量的电子在光电倍增管的阳极负载上产生脉冲信号, 然后用射极跟随器改变输出阻抗, 将电信号输入到多道脉冲

分析器等电子仪器. 放置在月球表面的 NaI(Ti)-γ 谱仪就是用以 Ti 作为“激活剂”的 NaI 作为闪烁体的闪烁探测器.

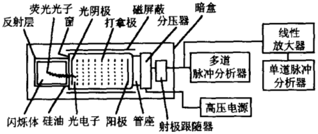


图 4.2.7 闪烁探测器组成示意图

硅微条探测器

硅微条探测器(silicon microstrip detector)是 80 年代初研制成功的一种基于硅 PN 结二极管的径迹探测器,其结构如图 4.2.8 所示. 在高阻(约 2000 Ω · cm)的 N 型硅片的一边制成间距为 20 μm 的条状 P^+掺杂层(掺硼);另一边制成 N^+掺杂层(掺磷),两边都镀上 1 μm 厚的铝层. 在相距 280 μm 的 P^+和 N^+电极间加上适当的反向电压 160 V 左右,硅片中的载流子将被耗尽,形成耗尽层区. 当入射粒子通过耗尽层区时,其轨道附近产生正负电荷对: 电子和空穴. 电子和空穴的漂移运动在邻近的一个或几个微条上产生电信号,这种信号被在探测硅片上的集成电路加以放大处理. 由于应用了集成电路制造工艺,可以大批量低成本制作,性能稳定可靠. 多层微条探测器可以确定入射粒子的运动轨迹的空间坐标. 显示入射粒子的径迹的精度为微条间距的几分之一,约为 5～10 μm. 为多丝正比室的

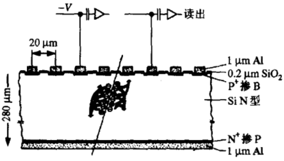


图 4.2.8 硅微条探测器结构

1/20. 因此它能更精确地确定粒子的径迹. 自 80 年代以来,硅微条探测器已广泛应用于粒子物理实验. 1995 年 3 月美国费米国家实验室宣布找到了顶夸克,两个实验组都应用了硅微条探测器.

4.3 粒子的碰撞和散射

4.3.1 洛伦兹变换

空间-时间四维矢量的洛伦兹变换[①]

实验表明在各种惯性系统中光速都相同. 这是和伽利略变换矛盾的. 爱因斯坦的狭义相对论解决了这个问题. 狭义相对论认为:相对作高速运动的惯性系之间,需要用洛伦兹变换关系进行坐标变换,才能符合光速在不同惯性系中相同的基本事实. 同时,也能保证在不同的惯性系中,物理规律的形式是一样的. 在坐标轴相互平行的两个惯性系之间,如果坐标系 $x'y'z'$ 沿 x 方向以速度 v 相对于坐标系 xyz 运动,假设在某一起始时刻 $t=t'=0$,洛伦兹时间-空间变换关系为

$$\left.\begin{aligned} x' &= \frac{x - vt}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \\ y' &= y, \\ z' &= z, \\ t' &= \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \end{aligned}\right\} \tag{4.3.1}$$

为简化公式,通常引入

$$\beta = \frac{v}{c}, \tag{4.3.2}$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}. \tag{4.3.3}$$

---

① 章乃森,粒子物理学,上册,科学出版社,1986,p83.

动量-能量四维矢量的洛伦兹变换

一个系统中动量 $\boldsymbol{p}(p_x,p_y,p_z)$ 和能量 E 组成另一组洛伦兹变换关系：

$$\left.\begin{aligned} p_x' &= \gamma(p_x - \beta E/c), \\ p_y' &= p_y, \\ p_z' &= p_z, \\ E' &= \gamma(E - \beta p_x c). \end{aligned}\right\} \tag{4.3.4}$$

根据上式可得洛伦兹不变式：

$$E^2 - \boldsymbol{p}^2c^2 = E'^2 - \boldsymbol{p}'^2c^2 = \text{constant}. \tag{4.3.5}$$

如果系统为静质量为 m_0 的单一粒子，将 $x'y'z'$ 系统固定在 m_0 上，即 m_0 粒子在 $x'y'z'$ 系内是静止的，其动量 $\boldsymbol{p}'=0$，则此时洛伦兹不变量的常数为 $m_0^2c^4$：

$$E^2 - \boldsymbol{p}^2c^2 = E'^2 = m_0^2c^4. \tag{4.3.6}$$

对于多粒子系统，在粒子之间无相互作用时，有洛伦兹不变式

$$\left(\sum_i E_i\right)^2 - \left(\sum_i \boldsymbol{p}_i\right)^2 c^2 = \text{constant}. \tag{4.3.7}$$

从 xyz 系统观测固定在 $x'y'z'$ 系统中的粒子 m_0，可得

$$p = \frac{\beta E'}{c\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{m_0 c\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} = \gamma m_0 c\beta = mc\beta, \tag{4.3.8}$$

$$E = \frac{E'}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} = \gamma m_0c^2 = mc^2. \tag{4.3.9}$$

如果定义粒子的动能 T 是粒子总能量 E 减去粒子的静能量 m_0c^2，则有：

$$T = E - m_0c^2 = (\gamma - 1)m_0c^2. \tag{4.3.10}$$

4.3.2 实验室坐标系和质心坐标系

质心系

设一组质量分别为 $m_1, m_2, \cdots, m_k$ 的粒子，它们在实验室坐标系中的坐标分别为 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_k$，定义该粒子系的质心在实验室坐标系中的坐标为

$$\boldsymbol{r}_c = \frac{\sum_{i=1}^{k} m_i \boldsymbol{r}_i}{\sum_{i=1}^{k} m_i}. \tag{4.3.11}$$

质心在实验室坐标系中的速度为

$$\boldsymbol{v}_c = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_c}{\mathrm{d}t} = \frac{\sum_{i=1}^{k} m_i \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}}{\sum_{i=1}^{k} m_i} = \frac{\sum_{i=1}^{k} m_i \boldsymbol{u}_i}{\sum_{i=1}^{k} m_i} = \frac{\sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{p}_i}{\sum_{i=1}^{k} m_i}. \tag{4.3.12}$$

与质心相对静止的坐标系称为质心系. 若将粒子系统在质心系中的坐标分别表示为 $\boldsymbol{r}_1^*, \boldsymbol{r}_2^*, \cdots, \boldsymbol{r}_k^*$, 质心在质心系中的坐标为 $\boldsymbol{r}_c^*$, 用 * 号表示质心系中的量, 同样有:

$$\boldsymbol{r}_c^* = \frac{\sum_{i=1}^{k} m_i \boldsymbol{r}_i^*}{\sum_{i=1}^{k} m_i}. \tag{4.3.13}$$

因为在质心系中质心是静止的, 故有

$$\boldsymbol{v}_c^* = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_c^*}{\mathrm{d}t} = \frac{\sum_{i=1}^{k} m_i \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_c^*}{\mathrm{d}t}}{\sum_{i=1}^{k} m_i} = \frac{\sum_{i=1}^{k} m_i \boldsymbol{u}_i^*}{\sum_{i=1}^{k} m_i} = \frac{\sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{p}_i^*}{\sum_{i=1}^{k} m_i} = 0, \tag{4.3.14}$$

即在质心系中这组粒子的总动量 $\boldsymbol{p}^*$ 为零, 即

$$\boldsymbol{p}^* = \sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{p}_i^* = 0. \tag{4.3.15}$$

反应有效能量

先考虑非相对论情况下两体 (m_1, m_2) 反应在质心系中的相互作用有效能量 E^*. 设在实验室坐标系中, 质量为 m_1、速度为 $\boldsymbol{u}_1$ 的粒子和质量为 m_2 的静止靶粒子碰撞. 在质心系中看, 两粒子以速度 $\boldsymbol{u}_1^*$, $\boldsymbol{u}_2^*$ 对头碰撞, 其总动量 $\boldsymbol{p}^*$ 为零:

$$m_1 \boldsymbol{u}_1^* + m_2 \boldsymbol{u}_2^* = \boldsymbol{p}_1^* + \boldsymbol{p}_2^* = \boldsymbol{p}^* = 0. \tag{4.3.16}$$

在实验室坐标系中两粒子的总动量、总能量和质心速度分别为

$$\boldsymbol{p} = m_1 \boldsymbol{u}_1, \tag{4.3.17}$$

$$E = \frac{1}{2}m_1 u_1^2, \tag{4.3.18}$$

$$\boldsymbol{v}_c = \frac{m_1 \boldsymbol{u}_1}{m_1 + m_2}. \tag{4.3.19}$$

而在质心系中两粒子的速度 $\boldsymbol{u}_1^*$，$\boldsymbol{u}_2^*$ 分别为

$$\boldsymbol{u}_1^* = \boldsymbol{u}_1 - \boldsymbol{v}_c = \frac{m_2 \boldsymbol{u}_1}{m_1 + m_2}, \tag{4.3.20}$$

$$\boldsymbol{u}_2^* = -\frac{m_1 \boldsymbol{u}_1}{m_1 + m_2}, \tag{4.3.21}$$

两粒子的总能量 E^* 为

$$\begin{aligned} E^* &= \frac{1}{2}m_1 \boldsymbol{u}_1^{*2} + \frac{1}{2}m_2 \boldsymbol{u}_2^{*2} \\ &= \frac{1}{2}m_1 \frac{m_2^2 \boldsymbol{u}_1^2}{(m_1 + m_2)^2} + \frac{1}{2}m_2 \frac{m_1^2 \boldsymbol{u}_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\right)\boldsymbol{u}_1^2 = \frac{1}{2}\mu \boldsymbol{u}_1^2. \end{aligned} \tag{4.3.22}$$

其中

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{4.3.23}$$

称为折合质量. 公式(4.3.22)表明，两粒子系统在质心系中的总能量 E^* 相当于一个质量为 μ 的粒子以速度 $\boldsymbol{u}_1$ 运动的动能，小于实验室系中的总能量 E. 其差值为

$$E - E^* = \frac{1}{2}m_1 \boldsymbol{u}_1^2 - \frac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\boldsymbol{u}_1^2 = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)v_c^2, \tag{4.3.24}$$

恰好是质心以质心速度移动的动能. 这一部分能量对两粒子之间的相互作用没有贡献；而在质心系中两粒子相对运动的总能量，才是产生新粒子或激发粒子体系内部自由度的相互作用有效能量.

在相对论情况下，两体反应运动学必须通过洛伦兹变换. 在实验室坐标系中动量为 $\boldsymbol{p}_1$、质量为 m_1 的粒子和质量为 m_2 的静止靶粒子碰撞，碰撞前质心以速度 v_c 相对于实验室系运动，两粒子在实验室系和质心系中的动量-能量四维矢量分别记为

$$\boldsymbol{p}_1 = (\boldsymbol{p}_1, \mathrm{i}E_1), \quad \boldsymbol{p}_2 = (0, \mathrm{i}m_2 c^2);$$

$$\boldsymbol{p}_1^* = (\boldsymbol{p}_1^*, \mathrm{i}E_1^*), \quad \boldsymbol{p}_2^* = (\boldsymbol{p}_2^*, \mathrm{i}E_2^*). \tag{4.3.25}$$

它们在实验室系和质心系中的总动量和总能量分别记为 $\boldsymbol{p}, E$ 和 $\boldsymbol{p}^*, E^*$. 因为 $\boldsymbol{p}^* = \boldsymbol{p}_1^* + \boldsymbol{p}_2^* = 0$,根据洛伦兹不变式可得

$$(E_1 + E_2)^2 - (\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2)^2 c^2 = (E_1^* + E_2^*)^2 - (\boldsymbol{p}_1^* + \boldsymbol{p}_2^*)^2 c^2, \tag{4.3.26}$$

$$(E_1 + m_2 c^2)^2 - \boldsymbol{p}_1^2 c^2 = (E_1^* + E_2^*)^2 = E^{*2}. \tag{4.3.27}$$

即

$$E^{*2} = 2E_1 m_2 c^2 + m_1^2 c^4 + m_2^2 c^4. \tag{4.3.28}$$

当入射粒子能量很大,等式右边第一项远大于第二、第三项之和时,有

$$E^* \approx \sqrt{2E_1 m_2 c^2} \propto \sqrt{E_1}. \tag{4.3.29}$$

因此,在高能情况下,加速粒子打静止靶时,可用来产生新粒子或激发内部自由度的反应有效能量 E^*——质心系的总能量,与入射粒子总能量的平方根成正比. 因此将加速器的能量提高 100 倍,反应有效能量才提高 10 倍,能量利用率很低. 在两粒子质量和能量都相同,而动量反向时,实验室系和质心系中的总动量都为零,反应有效质量,即质心系中的总能量,就等于实验室系中的总能量,全部能量都得到了充分有效的利用.

反应 Q 值和阈能

考虑两体反应的情况:

$$m_1 + m_2 \rightarrow m_3 + m_4, \tag{4.3.30}$$

反应前后的动能差定义为 Q 值,Q 值是反应过程中释放的能量:

$$Q = (T_3 + T_4) - (T_1 + T_2), \tag{4.3.31}$$

由总能量守恒:

$$E_1 + E_2 = E_3 + E_4, \tag{4.3.32}$$

在没有粒子激发能时,$E_i = T_i + m_i c^2$,因此:

$$Q = (m_1 + m_2)c^2 - (m_3 + m_4)c^2. \tag{4.3.33}$$

$Q>0$ 的反应称为放热反应,这种反应能否发生与入射粒子的能量无关. $Q<0$ 的反应称为吸热反应,只有当入射粒子的能量大于或等于某一值时,吸热反应才可能发生. 能产生这种吸热反应的入射粒

子实验室能量的最小值 E_{th}，称为该吸热反应的阈能. 在阈能反应时，产生的全部末态粒子在质心系中都处于静止状态. 对于一般的吸热反应过程

$$a+b\rightarrow 1+2+\cdots+n, \tag{4.3.34}$$

根据洛伦兹不变式有

$$(E_a+E_b)^2-(\boldsymbol{p}_a c+\boldsymbol{p}_b c)^2=\Big(\sum_i E_i^*\Big)^2=\Big(\sum_i m_i c^2\Big)^2, \tag{4.3.35}$$

对打静止靶 $E_b=m_b c^2$ 的情况，可得

$$(E_{\text{th}}+m_b c^2)^2-p_{\text{th}}^2 c^2=\Big(\sum_{i=1}^n m_i\Big)^2 c^4, \tag{4.3.36}$$

$$E_{\text{th}}^2+2m_b c^2 E_{\text{th}}+m_b^2 c^4-p_{\text{th}}^2 c^2=\Big(\sum_{i=1}^n m_i\Big)^2 c^4, \tag{4.3.37}$$

$$m_a^2 c^4+2m_b c^2 E_{\text{th}}+m_b^2 c^4=\Big(\sum_{i=1}^n m_i\Big)^2 c^4. \tag{4.3.38}$$

其反应阈能为

$$E_{\text{th}}=\frac{\Big(\sum_{i=1}^n m_i\Big)^2-(m_a^2+m_b^2)}{2m_b}c^2, \tag{4.3.39}$$

反应阈动能为

$$\begin{aligned}T_{\text{th}}&=\frac{\Big(\sum_{i=1}^n m_i\Big)^2-(m_a+m_b)^2}{2m_b}c^2\\&=\frac{\Big[\Big(\sum_{i=1}^n m_i\Big)+(m_a+m_b)\Big]\Big[\Big(\sum_{i=1}^n m_i\Big)-(m_a+m_b)\Big]}{2m_b c^{-2}}\\&=-Q\,\frac{\Big[\Big(\sum_{i=1}^n m_i\Big)+(m_a+m_b)\Big]}{2m_b}.\end{aligned} \tag{4.3.40}$$

低能和在非相对论情况下，质量随运动速度变化不大，反应前后总质量变化不大，可以认为：

$$\Big(\sum_{i=1}^n m_i\Big)\approx(m_a+m_b), \tag{4.3.41}$$

因此：

$$T_{\mathrm{th}}=-Q\frac{m_a+m_b}{m_b}. \tag{4.3.42}$$

和低能核反应的阈动能公式一致.

例题 4.3.1　用一个动能为 E_{k} 的高速质子去轰击氢靶（质子），观察到下列反应：

(1) $\mathrm{p+p\to p+p+p+\bar{p}}$

(2) $\mathrm{p+p\to p+p+K^++K^-}$

(3) $\mathrm{p+p\to \pi^++D}$

求入射质子的阈能. 如果使两个质子对撞，求观察到上列反应每个质子的阈能.

解

$$E_{\mathrm{th}}=\frac{\left(\sum_{i=1}^{n}m_i\right)^2-(m_a^2+m_b^2)}{2m_b}c^2$$

(1) $\mathrm{p+p\to p+p+p+\bar{p}}$

$$m_{\mathrm{p}}=938.3\ \mathrm{MeV},\quad E_{\mathrm{th}}=7m_{\mathrm{p}}c^2=6.57\ \mathrm{GeV}.$$

(2) $\mathrm{p+p\to p+p+K^++K^-}$

$$m_{\mathrm{p}}=938.3\ \mathrm{MeV},\quad m_{\mathrm{K}}=493.7\ \mathrm{MeV},$$

$$E_{\mathrm{th}}=\frac{4(m_{\mathrm{p}}+m_{\mathrm{K}})^2-2m_{\mathrm{p}}^2}{2m_{\mathrm{p}}}c^2=3.43\ \mathrm{GeV}.$$

(3) $\mathrm{p+p\to \pi^++D}$

$$m_{\mathrm{p}}=938.3\ \mathrm{MeV},\quad m_{\pi}=139.6\ \mathrm{MeV},$$

$$m_{\mathrm{D}}=2.014\,102\times 931.5\ \mathrm{MeV},$$

$$m_{\mathrm{th}}=\frac{(m_\pi+m_{\mathrm{D}})^2 2m_{\mathrm{p}}^2}{2m_{\mathrm{p}}}=1.23\ \mathrm{GeV}.$$

对撞时洛伦兹不变式中

$$(E_a+E_b)^2-(\boldsymbol{p}_a c+\boldsymbol{p}_b c)^2=\left(\sum_i E_i^*\right)^2=\left(\sum_i m_i c^2\right)^2,$$

$$\boldsymbol{p}_a c+\boldsymbol{p}_b c=0,\quad E_a=E_b=E_{\mathrm{th}},\quad E_{\mathrm{th}}=\frac{1}{2}\sum_i m_i c^2.$$

每个质子的阈能为

(1) $E_{th}=2m_pc^2=1.877\ \text{GeV}$,

(2) $E_{th}=(m_p+m_K)c^2=1077.9\ \text{MeV}$,

(3) $E_{th}=\frac{1}{2}(m_\pi+m_D)c^2=1001.3\ \text{MeV}$.

4.3.3 高能电子散射

弹性散射

卢瑟福根据 α 粒子的大角散射提出了原子有核模型，为探索物质微观结构开拓了成功的途径. 从 50 年代起斯坦福大学的霍夫斯塔特(R. Hofstadter)就研究高能电子与原子核及核子的散射，进一步探索原子核和核子的结构. 入射电子的动能 E 越大，其德布罗意波长$\lambda\!\!\!^-$越短，可达到的分辨率越高，当 $E\gg mc^2$ 时，$E\approx pc$，有：

$$\lambda\!\!\!^- = \frac{\hbar}{p} \approx \frac{\hbar c}{E}, \tag{4.3.43}$$

常数$\hbar c=197\ \text{MeV}\cdot\text{fm}$. 散射过程的几率用散射截面 $\text{d}\sigma$ 来描述：当每秒有一个粒子通过单位截面时，所发生的散射事件数称为散射截面；微分散射截面 $\text{d}\sigma/\text{d}\Omega$ 表示在单位时间沿空间某个方向单位立体角内散射的粒子数. 电子在点状带电粒子上的弹性散射微分截面在非相对论情况下由卢瑟福公式给出，在相对论情况下由莫特(N. F. Mott)公式给出①：

$$\frac{\text{d}\sigma}{\text{d}\Omega} = \frac{\alpha^2}{q^2}\left(\frac{E'}{E}\right)\cot^2\frac{\theta}{2}, \tag{4.3.44}$$

α 为精细结构常数. 入射电子的能量、动量为$(E,\boldsymbol{p})$，散射电子的能量、动量为$(E',\boldsymbol{p}')$，q^2 是电子给予靶粒子的 4 维动量转移平方的绝对值：$q^2=|(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')^2|$. 当 $E,E'\gg mc^2$ 时，$q^2\approx 4EE'\sin^2\frac{\theta}{2}$. 此时：

$$\frac{\text{d}\sigma}{\text{d}\Omega} = \frac{4\alpha^2E'^2}{q^4}\cos^2\frac{\theta}{2}. \tag{4.3.45}$$

霍夫斯塔特等在 1953 年完成 190 MeV 电子在原子核上的散射实验，发现在大散射角区(即大 q^2 区)，结果与莫特公式(4.3.44)偏离.

① 本小节中以下部分公式均采用自然单位制.

表明靶粒子不能看成是点状粒子，而具有一定的形状. 此时微分散射截面公式表示为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Mott}F^2(q^2),\tag{4.3.46}$$

其中 $F(q^2)$ 称为靶粒子的电荷形状因子，对球形靶粒子，是靶粒子电荷分布函数 $\rho(r)$ 的傅里叶变换：

$$F=\frac{4\pi}{Q}\int_0^\infty r\rho(r)\sin(Qr)dr,\tag{4.3.47}$$

其中 $Q=\sqrt{q^2}$. 测量出微分散射截面可得电荷形状因子，由傅里叶反变换可得靶粒子的电荷分布函数. $q^2=0$ 时 $F(q^2)=1$，相当于电子没有被偏转；$F(q^2)$ 随着 q^2 的增加而减小，并显示出类似光的衍射行为. 这是因为入射电子在有限大小粒子上不同部位散射的波相互叠加.

下表给出了靶粒子电荷密度分布 $\rho(r)$ 与形状因子 $F(q^2)$ 之间的关系. 当靶粒子电荷密度分布 $\rho(r)$ 趋于点粒子分布时，形状因子 $F(q^2)$ 趋于常数，高能电子与核子深度非弹性散射证实：核子内部电荷分布不是弥散的分布，而是分成许多点状的分布. 这些点状粒子称为部分子(parton)，这是核子由更小的粒子——夸克和胶子组成的证据.

表 4.3.1

$\rho(r)$	$F(q^2)$
$\delta(r)$	1
$\rho_0 e^{-r/a}$	$(1+q^2a^2)^{-2}$
$\rho_0 e^{-(r/b)^2}$	$e^{-q^2b^2/4}$
$\begin{cases}\rho_0, & r\leqslant R\\ 0, & r>R\end{cases}$	$\frac{3[\sin qR-qR\cos qR]}{(qR)^3}$

1956 年电子能量达到 600 MeV，相应的德布罗意波长 $\lambda\!\!\!^{-}\approx$ 0.3 fm，用它去轰击核子时，在大 q^2 区得到了更多、更精确的数据. 实验表明，每种核子对点状粒子的偏离可用两个形状因子 $F_1(q^2)$ 和 $F_2(q^2)$ 来描述，微分散射截面由罗森布勒斯(Rosenbluth)公式给出：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Mott}}\left\{F_1^2+\frac{q^2}{4M}\left[(F_1+\kappa F_2)^2\tan^2\frac{\theta}{2}+\kappa^2F_2^2\right]\right\},\tag{4.3.48}$$

其中 M 为核子的质量，κ 为核子的反常磁矩：$\kappa_p=2.79$，$\kappa_n=-1.91$，单位是核磁子. 两个形状因子 $F_1(q^2)$和 $F_2(q^2)$分别反映出核子电荷和磁矩的分布，它们都随 q^2 的增加而减小. 由于对核子结构的研究，霍夫斯塔特获得了 1961 年诺贝尔物理学奖.

比约肯求和规则

高能电子与靶粒子除了弹性散射外，还有非弹性散射. 非弹性散射是指靶粒子被激发，或者有新粒子产生. 比约肯(J. D. Björken)利用"流代数"研究了高能电子与核子非弹性散射的"求和规则". 为了表征弹性散射，只需要一个运动学变量 q^2，对于非弹性散射，还需要另外一个运动学变量，例如实验室坐标系的能量损失 $\nu=E-E'$. 比约肯的求和规则为

$$\int_{q^2/M}^{\infty}d\nu\left[W_2^p(\nu,q^2)+W_2^n(\nu,q^2)\right]\geqslant\frac{1}{2},\tag{4.3.49}$$

其中 $W_2^{p,n}(\nu,q^2)$是质子和中子的结构函数. 这个规则等价于：

$$\lim_{E\to\infty}\left[\frac{d\sigma_{ep}}{dq^2}+\frac{d\sigma_{en}}{dq^2}\right]\geqslant\frac{2\pi\alpha^2}{q^4},\tag{4.3.50}$$

其中 σ_{ep}和 σ_{en}是电子在核子上弹性和非弹性散射的总截面，此式已经对另一个变量 ν 进行了积分. 比约肯还提出高能非弹性散射的结构函数在 q^2 和 ν 都很大时只与它们的比值 $q^2/2M\nu$ 有关. 他的这个结论是在深度非弹性散射实验之前提出的，对实验数据的分析起了重要作用，而论文却是在实验之后发表的. 比约肯对自己的理论竟然会预示出核子内有点状结构信心不足，提到夸克时也采取慎重的态度.

深度非弹性散射

美国斯坦福大学的 20 GeV 电子直线加速器 1967 年初建成后，最初重复了低能电子的工作，即值 q^2 不大的情况，没有发现核子偏离点状结构. 当 q^2 达到 GeV^2 量级时发现：弹性散射过程在大 q^2 区很小，非弹性散射过程

$$e^-+p\to e^-+X\tag{4.3.51}$$

占据主要地位. 其中 X 代表任意数量的强子. 这种大动量传输产生多个强子的现象称为深度非弹性散射. 靶粒子以质子为例，在弹性散射过程中，散射质子四维动量 p' 满足 $p'^2=M^2$；在非弹性散射过程中，散射质子四维动量 $p_X^2>M^2$. 其微分散射截面为

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}=\frac{\alpha^2}{q^2}\frac{E'}{E}[2q^2W_1^{em}(q^2,\nu)+(4EE'-q^2)W_2^{em}(q^2,\nu)],\tag{4.3.52}$$

其中上标 em 表示电磁相互作用. 高能非弹性散射发现，形状因子随 q^2 增加而减小，表明靶粒子是有限大小的. 这里入射粒子能量更高，q^2 更大，分辨率更高，能分辨细微结构的高能电子探针获得的信息是形状因子又与 q^2 值无关，说明核子内存在更小的点状粒子. 由于电子是带电的，由它探测到的粒子也是带电的. SLAC 主任潘诺夫斯基(W. Panofsky)在 1968 年维也纳国际高能物理会议上宣布："这些数据可能给出了核子内部带电的点状粒子行为的证据."强子的内部结构在实验上终于得到了证实. 进行深度非弹性散射研究工作的弗里德曼(J. Friedman)、肯达尔(H. Kendall)和泰勒(R. Talor)获得了 1990 年诺贝尔物理学奖.

4.4 粒子及其基本性质

4.4.1 粒子按相互作用分类

四种基本相互作用

现在已经发现的粒子间的相互作用有四种. 一种是引力相互作用(gravitational interaction)，其媒介粒子是引力子；一种是电磁相互作用(electromagnetic interaction)，其媒介粒子是光子(photo). 这两种媒介粒子的静止质量都是零. 这就决定了这两种相互作用都是长程相互作用，随距离的增加而减弱得不快. 在宏观世界中就可以观察和研究，这在 19 世纪就已经研究得相当清楚了. 第三种相互作用为弱相互作用(weak interaction)，它的媒介粒子是 W^+、W^- 和 Z^0 粒子，这三种粒子都有很重的静止质量，约为 80～90 GeV，这就决定了

弱相互作用的力程约为 10^{-18} m. 第四种相互作用为强相互作用(strong interaction)或色相互作用(color interaction). 夸克之间的相互作用为色相互作用,核子之间的相互作用为强相互作用,强相互作用是色相互作用的剩余相互作用,类似于范德瓦耳斯相互作用是电磁相互作用的剩余相互作用一样. 强相互作用的媒介粒子为介子,最轻的介子是 π 介子(pion). π 介子的静止质量为 139 MeV,因此它的力程约为 10^{-15} m,也是短程相互作用. 色相互作用的媒介粒子是胶子,其静止质量和介子差不多,因此色相互作用的力程也是 10^{-15} m 量级. 由于色相互作用是原始的强相互作用,因此强相互作用基本的媒介粒子不包括介子,只包括 8 种胶子(gluon).

在粒子物理中由于引力相互作用太弱,一般不考虑. 凡是涉及光子的反应都是电磁相互作用;凡是涉及中微子的反应都是弱相互作用;电子、μ 子和 τ 子可以参与电磁相互作用和弱相互作用;一般说来其余粒子都能参与三种相互作用.

相互作用和截面

在研究粒子反应过程中发现: 强相互作用过程比如 π^+ 和 p 的散射过程,其散射总截面约为 10 mb;电磁相互作用过程比如光子轰击质子和氘核的过程,其散射总截面约为 10^2 μb,约为强相互作用过程的 10^{-2}～10^{-3}倍;弱相互作用过程比如中微子与核子的反应过程,其散射总截面约为 10^{-14} b,约为强相互作用过程的 10^{-12}倍. 以上三种典型过程的截面正好反映了他们的相对强度: $1:10^{-2}:10^{-12}$,截面越大,粒子之间的作用就越强.

相互作用力程

通常用媒介粒子的康普顿波长来描述相应的相互作用的力程. 以电磁相互作用为例,在电子和质子的弹性散射中,电子和质子之间的相互作用被认为是交换一个光子,由于此光子是在中间过程中出现的,出现的时间 Δt 很短,很难被探测到,因此这种光子被称为虚光子. 设虚光子从发射到被吸收的时间为 Δt,虚光子的能量为 E,由不确定关系 $\Delta t \cdot E \approx \hbar$,虚光子传播的路程为

$$l = c\Delta t \approx \frac{\hbar c}{E}, \tag{4.4.1}$$

由狭义相对论 $E=(p^2c^2+m^2c^4)^{1/2}$，粒子的最小能量为 $E_{\min}=mc^2$，这样：

$$l_{\max} \approx \frac{\hbar}{mc} = \lambda. \tag{4.4.2}$$

这个虚粒子传播的最大距离被称为相互作用的力程.数值上就等于该虚粒子的康普顿波长.由于光子的静止质量 $m=0$，因此电磁相互作用的力程为无穷大.理论上预言引力场的媒介粒子引力子的静止质量也为零，因此引力相互作用的力程也是无穷大.弱相互作用的中间波色子的质量为

$$m_{W^\pm} = (80.22 \pm 0.26)\text{GeV},$$
$$m_{Z^0} = (91.173 \pm 0.020)\text{GeV}. \tag{4.4.3}$$

由此可得弱相互作用的力程为 10^{-3} fm.强相互作用比较复杂，研究发现，除交换 π 介子外，还可能交换更多的粒子，如矢量介子 ρ,ω 和 ϕ 等.这些粒子比 π 介子的静止质量大，因此由 π 介子的静止质量 197 MeV，可得强相互作用的力程约为 1 fm，而交换矢量介子 ρ,ω 和 ϕ 等的力程更短.它们对核力的中、短程部分的贡献是不可忽略的.π 介子之间存在的强相互作用，不能用交换 π 介子来解释，仍然需要交换其他的粒子.因为参与强相互作用的粒子，如核子、π 介子和矢量介子 ρ,ω 和 ϕ 等都有其内部结构，需要从物质结构的夸克和胶子来解释.但是目前这一工作还远未完成.

粒子按照相互作用的性质分类

已经发现的粒子按照它们参与相互作用的性质一般分为场玻色子(field boson)、轻子(lepton)和强子(hadron).

4.4.2 场玻色子

各种相互作用的媒介粒子共 13 种.已经发现可以以自由状态存在的规范玻色子有四种：电磁相互作用的媒介粒子光子，弱相互作用的媒介粒子 W^+、W^- 和 Z^0 粒子，原始的强相互作用的媒介粒子胶子共 8 种，以及引力相互作用的媒介粒子引力子.1905 年爱因斯坦在金属的光电效应研究中提出了光子.1979 年丁肇中领导的小组首

次找到了支持胶子存在的证据①. 1982 年鲁比亚(C. Rubbia)和范德米尔(S. Van der Meer)发现中间玻色子 W^+、W^-和 Z^0,他们因此获得了 1984 年诺贝尔物理学奖. 只有引力子至今没有找到.

表 4.4.1 场玻色子表

相互作用	引力相互作用	电磁相互作用	弱相互作用	强相互作用
粒子	引力子	光子	$W^{\pm}$,Z^0	胶子
自旋	2	1	1	1
个数	1	1	3	8

4.4.3 轻子

轻子是不直接参与强相互作用的粒子. 已经发现的带电轻子有 3 种: 即电子、μ 子(muon)和 τ 子(tau). 它们都带有一个单位的负电荷. 还有 3 种分别和电子、μ 子和 τ 子对应的不带电的中性粒子,即 3 种中微子(neutrino),它们的静止质量很小,常常近似为零. 这 6 种粒子和它们的反粒子共 12 种轻子,它们都是自旋为 1/2 的费米子. 至今还没有证据说明轻子有任何结构.

表 4.4.2 轻子表

粒子	质量 /MeV	自旋宇称 J^P	平均寿命/s 质量宽度 Γ	衰变方式举例	反粒子
电子 e^-	0.51099906	1/2	$>6\times10^{29}$		e^+
ν_e	$<1.7\times10^{-5}$	1/2	稳定		$\bar{\nu}_e$
μ^-子	105.658387	1/2	2.19703×10^{-6}	$\mu^-\to e^-+\bar{\nu}_e+\nu_\mu$	μ^+
ν_μ	<0.27	1/2	稳定		$\bar{\nu}_\mu$
τ^-子	1784.1	1/2	3.0×10^{-13}	$\tau^-\to\mu^-+\bar{\nu}_\mu+\nu_\tau$	τ^+
ν_τ	<35	1/2	稳定		$\bar{\nu}_\tau$

电子和正电子

1897 年汤姆孙(J. J. Thomson) 在阴极射线的实验中确认了电子的存在. 1928 年狄拉克提出了相对论量子力学方程,给出了氢原子能级的精细结构,与实验符合得很好. 从这个方程还自动导出电子

① 唐孝威、童国梁,物理,**9**(1980)43.

的自旋量子数应为 1/2、电子的自旋磁矩和自旋角动量之比的朗德 g 因子为 2，给实验结果和物理假说以坚实的理论基础，使人们相信狄拉克方程是一个正确描述电子运动的理论. 1930 年狄拉克针对电子存在负能态提出空穴理论，能量和动量满足相对论关系：

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4 \tag{4.4.4}$$

给定动量 p，粒子有正负两个能态：

$$E = \pm \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \tag{4.4.5}$$

电子有正负两种能态，它们之间隔着能隙 $2mc^2$. 负能态没有下限，正能态的电子可以无限地跃迁下去，不断地放出光子，这就可以做成一种永动机. 为了解决电子在正负能态的异常行为，1930 年狄拉克提出了空穴理论，假设真空态的所有的负能级都填满电子，形成一个负能电子海. 由于泡利原理，正能电子不能跃迁进去. 能量大于能隙的光子可以将负能电子激发到正能态，在负能海中产生一个空穴. 这个空穴相当于负能海中的粒子，它的能量、动量、电荷、自旋和其他性质都和原来负能态的电子相反，是一个电荷 $+e$、自旋 1/2 的正能电子，预言了正电子的存在. 正电子(positron)是电子的反粒子. 实验中只能观测从真空激发出来的电子和正电子，不能观测狄拉克海中的无穷多个负能电子. 空穴理论的狄拉克海只是一个物理模型，形象地描述了正负电子偶产生和湮灭过程.

1932 年美国物理学家安德森在宇宙射线实验中观察到高能光子穿过重原子核附近时，可以转化为一个电子和一个质量与电子相同但带有单位正电荷的粒子，从而发现了正电子. 狄拉克对正电子的理论预言得到了证实. 正电子是电子的反粒子. 后来发现在原子核的所有 β^+ 衰变中都会产生正电子.

μ 子和 τ 子

1935 年汤川秀树提出了核力的介子场理论，预言了参与核子之间强相互作用的汤川介子的静止质量应该约为电子的 200 倍. 1936 年安德森在宇宙射线实验中发现了质量约为电子质量 206.77 倍的带正或带负单位电荷的粒子，当时人们曾认为它就是汤川介子，称为 μ 介子. 后来研究发现它不参与核子之间的强相互作用，因此改称为 μ 子，μ 子和其他粒子的相互作用性质与电子完全相同，理论上至今

不能解释既然 μ 子和电子的相互作用性质完全相同，为什么还存在质量为电子质量 206.77 倍的 μ 子？这个问题称为"e-μ"疑难. 1975 年首先在美国 SLAC，接着在德国 DESY 实验室正负电子对撞机中，在质心系能量 3.6 GeV 以上，发现有类似某种粒子产生时阈能处的峰状结构，被认为是 τ 子. 发现 τ 子的相互作用性质和电子、μ 子完全相同，但质量为 μ 子质量的 16.9 倍. "e-μ"疑难发展成为"e-μ-τ"疑难. μ 子和 τ 子都有带正电和带负电的两种，μ^+ 的反粒子是 μ^-，τ^+ 的反粒子是 τ^-.

μ 子的平均寿命为 2.19703×10^{-6} s，衰变方式为

$$\mu^- \to e^- + \nu_\mu + \bar{\nu}_e, \tag{4.4.6}$$

$$\mu^+ \to e^+ + \bar{\nu}_\mu + \nu_e. \tag{4.4.7}$$

1991 年我国高能物理学家精确测量了 τ 子的质量为 1776.9 ± 0.5 MeV. τ 子的平均寿命为 3.0×10^{-13} s，衰变方式为

$$\tau^- \to \mu^- + \nu_\tau + \bar{\nu}_\mu, \tag{4.4.8}$$

$$\tau^+ \to \mu^+ + \bar{\nu}_\tau + \nu_\mu. \tag{4.4.9}$$

μ 子和 τ 子最终都衰变成电子.

中微子

1930 年泡利提出中微子假设后，中微子存在的直接实验证据直到 1956 年才由柯温 (C. L. Cowan) 和莱茵斯 (F. Reines)[①]获得，他们利用反应堆反应产物的 β 衰变产生的反中微子，观测到了反中微子诱发的反应，从而证实了反中微子的存在：

$$\bar{\nu} + p \to n + e^+. \tag{4.4.10}$$

1962 年，美国科学家莱德曼 (L. Lederman) 等人在美国布鲁克海文实验室的 33 GeV 加速器上证实了 μ 子中微子和电子中微子是两种不同的中微子. 并由此形成了轻子有"代"的概念，他们也由于这一伟大的发现而荣获了 1988 年度的诺贝尔物理学奖[②]. 1975 年，一批物理学家在美国的斯坦福直线加速器的正负电子对撞机上发现了

① F. Reines and C. L. Cowan, *Phys. Rev.*, **113** (1959) 273.

② L. M. Lederman, M. Schwartz, J. Steinberger, et al., *Phys. Rev.* Lett. ***19*** (1962) 36.

τ轻子，佩尔（M. L. Perl）等人认为存在τ子中微子. 1998年7月初，从美国费米国立加速器实验室传来消息说，他们至少看到3条可能是由τ子中微子碰撞溴化银分子时产生的β子所留下的径迹①. 美国费米国家实验室2000年7月21日宣布，该实验室中来自美国、日本、希腊和韩国的54名科学家经过3年的合作研究，首次发现了表明τ子中微子存在的直接证据.

1968年，美国的戴维斯（R. Davis）建造了一个大型探测器，把它放在南达科他州的Homestake地下金矿中②③. 戴维斯等人采用390 000 L的C_2Cl_4，太阳中微子ν_e与^{37}Cl作用产生^{37}Ar：

$$\nu_e + {}^{37}\mathrm{Cl} \rightarrow {}^{37}\mathrm{Ar} + e^-. \qquad (4.4.11)$$

这个反应的阈能是$E_{th}=814$ keV. 390 000升的C_2Cl_4被太阳中微子照射一段时间之后，用化学提纯的办法把^{37}Ar提取出来，然后测量^{37}Ar的放射性，就可测得太阳中微子的通量. 实验测量到的太阳中微子通量约为理论预言值的三分之一，三分之二的太阳中微子丢失了，这就是太阳中微子丢失之谜.

由于不同的国家进行了不同的实验，采用了对不同能量中微子灵敏的不同技术，都测量到太阳中微子丢失了. 因此，太阳中微子丢失是一个被物理学界公认的实验事实. 中微子在空间中运动时可能在三种"味"之间互相转换. 中微子的这种行为称为中微子振荡. 太阳中微子丢失的最直观的解释是因为中微子有质量，存在中微子振荡. 太阳中微子在长距离的传播中，有一部分变成了其他类型的中微子.

超级神冈(Super-Kamiokande)合作组是一个由120名来自日本和美国23个研究单位的科学家组成的合作研究机构. 他们发现在395例μ子中微子事件中，自天而降的事例几乎是从地底下到达的事例数的两倍. 这一现象被解释为μ子中微子向τ子中微子的振荡，两种中微子的质量差为$\Delta m^2 \approx 2\times10^{-3}$ eV^2，且有较大的混合角. 继大气中微子实验结果公布之后，紧接着超级神冈的物理学家又报道了太阳中微子的实验结果. 他们的实验显示出中微子的振荡. 这些实

---

① M. Antia, Science, **281** (1998) 155.

② 何景棠，物理，**30** (2001) 74.

③ Jr Davis R *et al.*, Phys. Rev. Lett. **20** (1968) 1205.

验结果目前被人们看作是中微子振荡及中微子具有非零静止质量的最重要的证据. 当 1998 年 6 月 5 日这一消息公布后,中微子问题再一次成为物理学界和天文学界的热门话题. 在过去的几十年中,人们已经多次发现中微子具有静止质量的证据. 由于这些证据数据量少,不能完全令人信服,因此,大多数理论物理学家依然保持审慎的态度. 不过,这一次获得的证据是如此强有力,以致许多著名的物理学家都表示,他们绝对相信实验的结果. 利用中微子振荡实验只能得到不同“味”的中微子的质量之差,而不是它们的绝对质量. 中微子的静止质量到底是多少,还有待实验给出最后的结果.

4.4.4 强子

可以直接参与强相互作用的粒子统称为强子,它们又按自旋量子数和重子数分为两类:第一类为介子(meson),它们都是自旋量子数为零或正整数、重子数为零的强子;第二类为重子(baryon),它们都是自旋量子数为半奇数、重子数为+1 或−1 的强子.

已经发现的介子共 160 种;重子数为+1 的重子 138 种,它们的反粒子重子数为−1 的重子 138 种,共 276 种重子. 强子共 436 种. 在所有强子中,只有质子和反质子是稳定粒子,其他强子在自由状态下都要衰变,有少数几个强子主要通过电磁相互作用衰变,有一批强子是通过弱相互作用衰变,绝大多数强子是通过强相互作用衰变.

表 4.4.3 介子表

粒子	质量 /MeV	电荷 Q	自旋宇称 J^P	同位旋 I	I_3	重子数 b	奇异数 S	粲数 c	底数 B	寿命 τ/s	主要衰变方式	反粒子
π^+ π^-	139.6	+1 −1	0^-	1	+1 −1	0	0	0	0	2.6×10^{-8}	$\pi^+\to\mu^++\nu_\mu$ $\pi^-\to\mu^-+\nu_\mu$	π^- π^+
π^0	135.0	0	0^{-1}	1	0	0	0	0	0	0.83×10^{-16}	$\pi^0\to\gamma+\gamma$	π^0
K^+	493.7	+1	0^-	1/2	+1/2	0	+1	0	0	1.24×10^{-8}		K^-
K^0	497.7	0	0^-	1/2	−1/2	0	+1	0	0	0.89×10^{-10} 5.18×10^{-8}	$K_S^0\to\pi^++\pi^-$ $K_S^0\to\pi^0+\pi^0+\pi^0$	K^0
ϕ	1019.5	0	1^-	0	0	0	0	0	0	1.6×10^{-22}	$\phi\to K^++K^-$	ϕ
ψ'	3686	0	1^-	0	0	0	0	0	0	3.1×10^{-21}	$\psi'\to J/\psi+\pi^++\pi^-$	ψ'
D^+	1869.4	+1	0^-	1/2	+1/2	0	0	+1	0	9.1×10^{-13}	$D^+\to K^-+\pi^++\pi^+$	D^-

续表

粒子	质量 /MeV	电荷 Q	自旋宇称 J^P	同位旋 I	I_3	重子数 b	奇异数 S	粲数 c	底数 B	寿命 τ/s	主要衰变方式	反粒子
D^0	1864.7	0	0^-	1/2	−1/2	0	0	+1	0	4.8×10^{-13}	$D^0\to K^-+\pi^++\pi^-$	$\bar{D}^0$
B^+	5278	+1	0^-	1/2	+1/2	0	−1	0	+1	1.32×10^{-12}	$B^+\to J/\psi+K^+$ $B^+\to D^0+l+\nu^*$	B
B^0	5278	0	0^-	1/2	−1/2	0	−1	0	+1	1.33×10^{-12}	$B^0\to J/\psi+K^0$ $B^0\to D^-+l^++\nu$	$\bar{B}^0$
Υ	9460	0	1^-	0	0	0	0	0	0	6.6×10^{-20}	$\Upsilon\to l^++l^-$	Υ

表 4.4.4　重子表

粒子	质量 /MeV	电荷 Q	自旋宇称 J^P	同位旋 I	I_3	重子数 b	奇异数 S	粲数 c	底数 B	寿命 τ/s	主要衰变方式	反粒子
p	938.3	+1	$1/2^+$	1/2	1/2	+1	0	0	0	$>10^{30}$ y		$\bar{p}$
n	938.6	0	$1/2^+$	1/2	−1/2	+1	0	0	0	917	$n\to p+e^-+\bar{\nu}_e$	$\bar{n}$
Λ^0	1115.6	0	$1/2^+$	0	0	+1	−1	0	0	2.6×10^{-10}	$\Lambda^0\to p+\pi^-$ $\Lambda^0\to n+\pi^0$	$\bar{\Lambda}^0$
Σ^+	1189.4	+1	$1/2+$	1	+1	+1	−1	0	0	0.8×10^{-10}	$\Sigma^+\to p+\pi^0$ $\Sigma^+\to n+\pi^+$	Σ^+
Σ^0	1192.5	0	$1/2^+$	1	0	+1	−1	0	0	2.8×10^{-20}	$\Sigma^0\to\Lambda^0+\gamma$	Σ^0
Σ^-	1197.3	−1	$1/2^+$	1	−1	+1	−1	0	0	1.48×10^{-10}	$\Sigma^-\to n+\pi^-$	Σ^-
Ξ^0	1314.9	0	$1/2^+$	1/2	+1/2	+1	−2	0	0	2.9×10^{-10}	$\Xi^0\to\Lambda^0+\pi^0$	Ξ^0
Ξ^-	1321.3	−1	$1/2^+$	1/2	−1/2	+1	−2	0	0	1.64×10^{-10}	$\Xi^-\to\Lambda^0+\pi^-$	Ξ^+
Ω^-	1672.5	−1	$3/2^+$	0	0	+1	−3	0	0	0.82×10^{-10}	$\Omega^-\to\Lambda^0+K^-$ $\Omega^-\to\Xi^0+\pi^-$	$\bar{\Omega}^+$
Λ_c^+	2282.2	+1	$1/2^+$	0	0	+1	0	1	0	1.1×10^{-13}	$\Lambda_c^+\to\Lambda^0+\pi^++\pi^-$ $\Lambda_c^+\to p+K^-+\pi^+$	$\bar{\Lambda}_c^-$
Λ_b^0	5500	0	$1/2^+$	0	0	+1	0	0	−1	2.6×10^{-10}	$\Lambda_b^0\to\Lambda_c^++l^-+\nu$	$\bar{\Lambda}_b^0$

π 介子

1947 年英国物理学家鲍威尔在宇宙射线实验中又发现了一种质量约为电子质量 273 倍的带正或带负单位电荷的粒子，它与原子核之间有很强的相互作用，称为 π 介子，它的平均寿命为 2.603×10^{-8} s，π^+ 介子和 π^- 介子互为反粒子. 人们认为这才是汤川预言的介子. 1950 年在加速器实验中发现了中性的 π^0 介子，它比带电的 $\pi^\pm$ 介子质量轻一些，平均寿命为 8.4×10^{-16} s. π^0 介子的反粒子就是 π^0 介

子本身.π 介子的衰变为

$$\pi^+ \to \mu^+ + \nu_\mu, \tag{4.4.12}$$

$$\pi^- \to \mu^- + \bar{\nu}_\mu, \tag{4.4.13}$$

$$\pi^0 \to \gamma + \gamma. \tag{4.4.14}$$

K 介子

1947 年罗彻斯特(G. D. Rochester) 和巴特勒(C. C. Butler) 在宇宙射线中发现了一些奇异的粒子 Λ^0(Lambda),K^0(Kaon)和 K^+,1953 年在加速器实验中陆续发现了更多的奇异粒子 $\Sigma^\pm$(sigma),Σ^0,K^-,Ξ^-(xi),Ξ^0 等粒子,这些粒子在强相互作用中至少两个同时很快产生,而后分别单独地在弱相互作用中慢衰变为非奇异粒子.

中性的 K^0 介子是在强相互作用过程中产生的不带电的中性的奇异粒子.

$$\pi^- + p \to \Lambda^0 + K^0. \tag{4.4.15}$$

它的静止质量为 497.8 MeV.K^0 介子和它的反粒子 $\bar{K}^0$ 介子是不同的粒子.K^0 介子的同位旋第三分量为 $-1/2$,奇异数为 1,而 $\bar{K}^0$ 介子的同位旋第三分量为 $1/2$,奇异数为 -1.K^0 和 $\bar{K}^0$ 介子通过弱相互作用衰变时,由于同位旋和奇异数都不守恒,从衰变行为无法将它们分开.由于弱相互作用下 CP 变换不变性在相当好的程度保持,K^0 介子通过弱相互作用衰变时,应作为 CP 宇称为正的态和 CP 宇称为负的态的叠加态,这两个态分别按 CP 宇称守恒的要求而衰变.引入 CP 变换的本征态 K_S 和 K_L,它们对应的本征值分别为 $+1$ 和 -1:

$$|K_S^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle), \tag{4.4.16}$$

$$|K_L^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle + |\bar{K}^0\rangle), \tag{4.4.17}$$

这样 K^0 介子态可以表示为

$$|K^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K_S^0\rangle + |K_L^0\rangle). \tag{4.4.18}$$

K^0 介子衰变时,一部分表现为 CP 宇称为正的 K_S^0 介子,一部分表现为 CP 宇称为负的 K_L^0 介子.K_S^0 介子衰变为 CP 宇称为正的两个 π 介

子组成的末态. 而 K_L^0 介子的主要衰变方式中没有二体衰变. K_S^0 介子的平均寿命远比 K_L^0 介子平均寿命要短. 分别称为短寿命和长寿命中性 K 介子，其寿命分别为

$$\tau(K_S^0) = (0.8926 \pm 0.0012) \times 10^{-10}\,\text{s}, \qquad (4.4.19)$$

$$\tau(K_L^0) = (5.17 \pm 0.04) \times 10^{-8}\,\text{s}. \qquad (4.4.20)$$

K^+介子就是“θ-τ”疑难中的 θ^+粒子和 τ^+粒子. K^+介子也有两种衰变方式，衰变为两个或三个 π 介子，但在这两种衰变方式中 K^+介子的寿命是相同的. 都是 1.2×10^{-8} s，质量都是 493.8 MeV. K^+介子的反粒子是 K^-介子.

η 介子

1961 年发现一种中性的 η 介子(Eta)：

$$\pi^+ + D \to p + p + \eta. \qquad (4.4.21)$$

质量为(548.8 ± 0.6) MeV，衰变宽度为(1.08 ± 0.19) keV. 主要的衰变方式都不是强衰变而是电磁衰变.

核子

质子和中子常称为核子. 1919 年卢瑟福用 α 粒子轰击$^{14}_{7}N$ 产生了$^{17}_{8}O$ 和氢核，发现了质子. 1930 年查德维克发现了中子. 1956 年西格里(E. G. Segrè)、张伯伦(Owen Chamberlain) 等人在加速器的实验中，发现了反质子，即质量与自旋和质子相同，但带有一个单位负电荷的粒子. 接着又发现了反中子. 反中子的质量和自旋都和中子相同，但磁矩是正的. 他们因此获得了 1958 年诺贝尔物理学奖.

Λ^0 超子

参与强相互作用、质量超过核子的粒子常称为超子(hyperon). 原意只是这些粒子的质量超过核子. Λ^0 超子可以和 K^0 介子协同产生：

$$\pi^- + p \to \Lambda^0 + K^0, \qquad (4.4.22)$$

其平均寿命为 3.1×10^{-10} s. 质量为 1116 MeV. 衰变方式有两种：

$$\Lambda^0 \to p + \pi^-, \quad \Lambda^0 \to n + \pi^0. \qquad (4.4.23)$$

Σ 超子

Σ^+超子可以在下列反应中产生：

$$\pi^+ + p \to \Sigma^+ + K^+, \quad \pi^- + p \to \Sigma^0 + K^0. \quad (4.4.24)$$

Σ^+超子的平均寿命为0.8×10^{-10} s,质量为1189 MeV.衰变方式为

$$\Sigma^+ \to p + \pi^0, \quad \Sigma^+ \to n + \pi^+. \quad (4.4.25)$$

Σ^+超子的反粒子不是Σ^-超子,Σ^-超子的平均寿命为1.5×10^{-10} s,质量为1197 MeV.衰变方式为

$$\Sigma^- \to n + \pi^-. \quad (4.4.26)$$

Σ^+超子的反粒子为$\bar{\Sigma}^+$,Σ^-超子的反粒子为$\bar{\Sigma}^-$.$\bar{\Sigma}^-$是我国物理学家王淦昌在1959年发现的.Σ^0超子的质量为1192 MeV,平均寿命小于10^{-14} s.衰变方式为

$$\Sigma^0 \to \Lambda^0 + \gamma, \quad (4.4.27)$$

Σ^0超子的反粒子为$\bar{\Sigma}^0$.

Ξ 超子

Ξ 超子可以在下列反应中产生:

$$\pi^- + p \to K^0 + K^+ + \Xi^-, \quad K^- + p \to K^0 + \Xi^0, \quad (4.4.28)$$

Ξ^-超子是1952年在下列衰变现象中发现的:

$$\Xi^- \to \Lambda^0 + \pi^-, \quad (4.4.29)$$

质量为1321 MeV,平均寿命为1.7×10^{-10} s.其反粒子为$\bar{\Xi}^-$.

Ξ^0超子的衰变方式为

$$\Xi^0 \to \Lambda^0 + \pi^0, \quad (4.4.30)$$

质量为1315 MeV,平均寿命为3.0×10^{-10} s.其反粒子为$\bar{\Xi}^0$.

Ω^-超子

这个粒子在1964年才发现,可以在下列反应中产生:

$$K^- + p \to K^+ + K^0 + \Omega^-, \quad (4.4.31)$$

可以按下列方式衰变:

$$\Omega^- \to \Xi^- + \pi^0, \quad \Xi^0 + \pi^-, \quad \Lambda^0 + K^-. \quad (4.4.32)$$

Ω^-是一个质量较大的超子,质量为1672 MeV,平均寿命为1.8×10^{-10} s.Ω^-粒子的发现有力地支持了夸克模型.

稳定粒子和共振态

基本粒子在高能碰撞时,两三个粒子在短时间内结合在一起成

为一个粒子的状态，称为共振态(resonant state)[1]. 这种状态的粒子极不稳定，随后又衰变为其他粒子，寿命只有 $10^{-24}\sim10^{-22}$ s. 这表明共振态的衰变是通过强相互作用进行的. 共振态具有粒子的一切属性，只是寿命很短而已. 目前发现的共振态已经有 300 多种.

1952 年费米用加速器产生的 π^+ 介子轰击质子时，发现了第一个共振态. 当 $\pi^\pm$ 介子的入射能量 T_π 为 195 MeV 时，$\pi^\pm+\text{p}$ 的截面 $\sigma_{\pi\text{p}}$ 有一个共振峰，见图 4.4.1.

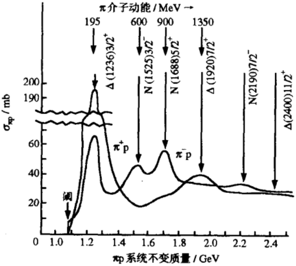


图 4.4.1　πp 总截面与入射 π 介子能量的关系

在实验室坐标系中，π 介子的能量为

$$E_\pi=m_\pi c^2+T_\pi=(140+195)\text{MeV}=335\ \text{MeV}, \tag{4.4.33}$$

由此可得 π 介子的动量为

$$p_\pi c=\sqrt{E_\pi^2-m_\pi^2c^4}=304\ \text{MeV}, \tag{4.4.34}$$

质子是静止的，能量 $E_\text{p}=938$ MeV，动量 $p_\text{p}=0$. 对于 πp 系统的能量，即共振态 Δ 粒子的能量为

$$E_\Delta=E_\pi+E_\text{p}=(335+938)\text{MeV}=1273\ \text{MeV}, \tag{4.4.35}$$

---

① 程檀生、钟毓澍，低能及中高能原子核物理学，北京大学出版社，1997 年 8 月，p461.

动量为

$$p_{\Delta}c = p_{\pi}c + p_{p}c = 304\ \mathrm{MeV}, \tag{4.4.36}$$

由此得出 Δ 粒子的质量，即 πp 系统的不变质量：

$$m_{\Delta} = \sqrt{E_{\Delta}^2 - p_{\Delta}^2 c^2} = 1236\ \mathrm{MeV}. \tag{4.4.37}$$

当 π^- 介子的入射能量 T_{π} 为 612 MeV 和 899 MeV 时，同样可以算得产生共振态粒子 N(1520 MeV) 和 N(1688 MeV).

共振态在原子中是作为能级出现的，弗兰克-赫兹实验证实了原子能级的存在. 一个出于激发态的原子不同于它处于基态和其他激发态的性质. 因为电磁相互作用引起的这种激发已经被很清楚地了解了，这些处于激发态的原子没有被认为是一个特殊种类的成员. 但是对于基本粒子则完全不同，因为它们之间的强相互作用和弱相互作用我们至今还没有真正了解.

在现已发现的粒子中只有 11 种粒子可能是真正稳定的. 这就是光子、3 种中微子和它们的反粒子、电子、正电子、质子和反质子. 粒子按衰变性质和行为分为稳定粒子和共振态两类：不能通过强相互作用衰变的粒子称为稳定粒子，可以通过强相互作用衰变的粒子称为共振态. 一般说来，通过强相互作用衰变的寿命短，通过电磁相互作用和弱相互作用衰变的寿命长，似乎可以用寿命的长短来区分稳定粒子和共振态，然而实际情况要复杂得多. 现在已经发现的粒子中，寿命最长和寿命最短的粒子都属于稳定粒子. 寿命最短的稳定粒子是 Z^0 粒子，平均寿命为$(2.59\pm0.03)\times10^{-25}$ s. 现已发现的最稳定的共振态为 Γ(10 355)粒子，它的平均寿命为 2.5×10^{-20} s，远长于 Z^0 粒子的平均寿命.

4.4.5 粒子的基本性质

质量和寿命

所有的粒子都有确定的质量，相对论指出，粒子的质量是速度的函数，粒子的运动可以很快，粒子的质量随速度的增加而增加. 当粒子的速度增加到真空光速时，粒子的质量将趋于无穷大. 如果某种自由粒子以真空光速运动，其质量为有限值，则这种粒子静止质量为

零，并且它只能以真空光速运动，速度不能减下来，光子就属于这类粒子. 粒子的质量是指粒子的静止质量. 现在已经发现的粒子质量分布在一个很大的范围内，已发现的具有静止质量的粒子中最轻的是电子，其质量为 0.510 999 06 MeV. 质子的质量为938.272 31 MeV. 最重的粒子是 Z^0 粒子，其质量为 91.187 GeV.

许多粒子是不稳定的粒子. 根据不确定原理，不稳定粒子的静能量也就是静质量有一分布，这个分布可以用两个参数 m 和 Γ 来描写，实验观测到的质量为 M，粒子质量取值在 m 附近的几率为

$$\rho(M)=\frac{\Gamma}{2\pi\left[(M-m)^2+\dfrac{\Gamma^2}{4}\right]}, \tag{4.4.38}$$

m 的物理意义是粒子实测质量值的期待值，也就是最可几取值，称为粒子的“质量”. Γ 的物理意义是质量的概率密度减到一半处 M 的值为 $m\pm\Gamma/2$. 这两个值之差为 Γ，称为粒子的质量宽度.

根据相对论的质能关系式，在粒子物理中，常用能量单位 MeV/c^2 作为质量的单位，有时也用 MeV 作为质量的单位. 质量宽度相当于能量宽度，由不确定关系，粒子的平均寿命 τ 和能量宽度也就是质量宽度之间满足不确定关系：$\Gamma\tau\sim\hbar$. 粒子的平均寿命越短，越不稳定，粒子的质量宽度就越大. 至今还没有观测到光子的质量，它们被认为是静止质量为零的粒子. 共振态的质量不能准确地测定，在测量共振态质量时由统计平均可得其平均质量 $\overline{m}$ 和质量的不确定度 Δm. 由质量的不确定度可得能量的不确定度 $\Delta E=\Delta mc^2$，能量的不确定度 ΔE 和共振态的平均寿命 τ 满足不确定关系 $\Delta E\cdot\tau=\hbar$，由此可以确定共振态的寿命 τ.

自旋和同位旋

所有的粒子都具有确定的自旋角动量，不应该把自旋理解为粒子的自转，自旋是粒子的内禀运动. 粒子按自旋量子数的取值分为两大类，遵从不同的统计规律：自旋量子数取非负整数的粒子称为玻色子，遵从玻色-爱因斯坦统计；自旋量子数取非负整数加二分之一的粒子称为费米子，遵从费米-狄拉克统计. 粒子分类的标准模型就是从自旋考虑的.

粒子自旋角动量在粒子运动方向的投影称为螺旋度，假设一个粒子在运动时自旋对运动方向是右旋的，但如果换到另一个沿同一方向以更快速度运动的参考系上来看，粒子的运动方向就反过来，自旋对运动方向变成了左旋. 这样粒子的螺旋度在不同参考系里可以不同. 在同一坐标系中中微子只有左旋，反中微子只有右旋，右旋中微子和左旋反中微子都是不存在的. 图 4.4.2 显示中微子和反中微子具有相反方向的螺旋度.

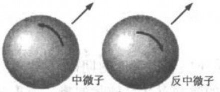


图 4.4.2　中微子和反中微子具有相反方向的螺旋度. 中微子的自旋和运动方向成左手螺旋，反中微子的自旋和运动方向成右手螺旋.

已经发现并已确定的粒子中具有最大的自旋量子数为 11/2. 没有迹象表明这种高自旋粒子是由许多自旋 1/2 的粒子同向排列造成的，理论上更合理的解释是由于内部轨道角动量高而造成的.

在强相互作用中，同位旋守恒. 当说同位旋在第三轴上的投影时，它的取值和粒子所带的电荷有关. 质子和中子统称核子，同位旋都是 1/2. 同位旋在第三轴上的投影为 1/2 时是质子，带单位正电荷；在第三轴上的投影等于 −1/2 时是中子，不带电荷. π 介子是同位旋为 1 的粒子，它在第三轴上的投影取 1、0、−1 时，分别是 π 介子的不同带电状态，即 π^+ 介子、π^0 介子和 π^- 介子.

粒子的磁矩

带电粒子的磁矩是指它的自旋磁矩 μ，它和粒子的自旋 S 满足：

$$\mu = -g\frac{e}{2m}S, \tag{4.4.39}$$

其中 e 是粒子的电荷，m 是粒子的质量，g 为朗德因子. g 因子随粒子自旋而定. 带电粒子的磁矩在某特殊方向的投影最大值为 $e/2m$，但实验精确测定粒子的磁矩值并不与此完全符合，其间的差别称为

反常磁矩. 电子一类点粒子的反常磁矩是自己产生的电磁场对自己的相互作用产生的;如果粒子有内部结构,如质子和中子都是由三个夸克组成的,三个夸克的正常磁矩的矢量和构成质子和中子的磁矩,自然给出较大的反常磁矩.

例题 4.4.1 能观测到静止质量的不确定度为 π 介子静止质量的质子的最长时间是多少? 在这段时间内 π 介子最长的移动距离是多少?

解

$$\Delta t = \frac{\hbar}{\Delta E} = 4.7 \times 10^{-24}\,\mathrm{s},$$

$$d = c\Delta t = 1.4 \times 10^{-15}\,\mathrm{m}.$$

例题 4.4.2 光子之间的相互作用可以这样来理解:每个光子在自由空间的传播过程中都会暂时变成"虚"的正负电子对,两个光子的这种"虚"的正负电子对之间可以产生电磁相互作用. (1) 假如 $h\nu \ll 2mc^2$,不确定原理允许"虚"的正负电子对存在多长时间? (2) 假如 $h\nu > 2mc^2$,在产生真实电子对时,原子核除保证能量动量守恒外,还起了什么作用?

解 (1) $\Delta t = \frac{\hbar}{2m_e c^2} = 6.4 \times 10^{-22}\,\mathrm{s}$;

(2) 原子核强电场使正负电子对分开足够远,从而不能再合成光子.

例题 4.4.3 π^0 介子既无电荷又无磁矩,为了解释它能衰变为一对传递电磁相互作用的光子,可以假设先衰变成一对"虚"核子-反核子,它们再发生电磁相互作用,产生两个光子. 不确定原理允许"虚"核子-反核子对存在多长时间?

解 $\Delta t = \frac{\hbar}{2m_p c^2} = 3.5 \times 10^{-25}\,\mathrm{s}$.

习 题

4.4.1 一个中性 π 介子衰变为两个 γ 光子: $\pi^0 \to \gamma + \gamma$. 计算由一个处于静止状态的 π 介子衰变为两个 γ 光子的波长.

4.4.2 很多短寿命粒子的静止能量不能直接测量,但是可以从其衰变产

物的动量和已知的静止能量推算.考虑一个 ρ^0 介子的衰变 $\rho^0 \to \pi^+ + \pi^-$，产生的 π 介子具有相反的动量 358.3 MeV/c. 计算 ρ^0 介子的静止能量.

4.5 对称性和守恒定律

4.5.1 内特尔定理

对称性和破缺

球体在绕过中心的任意对称轴旋转任意角度后，其形状和位置都不显现任何可以观测到的变化.球体的这种性质称为绕球心的旋转对称性.而要判断球体是否在转动，就需要在球上添加某些标记，这些标记的作用就是使球不再具有严格的旋转对称性，即在一定程度上破坏了旋转对称性.物理学上这种情况称为对称性破缺.

内特尔定理

德国女数学家内特尔 (Amalie Emmy Nöther)证明了一个重要定理：如果运动规律在某一不明显依赖时间的变换下具有不变性，必对应存在一个守恒定律.这个定理首先是在经典物理学中普遍证明的，很快证明在量子力学范围内也能普遍成立.这个定理的证明和确立是理论物理学的重要进展.

连续时空对称性

在空间平移变换下：

$$\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}, \tag{4.5.1}$$

所有的物理规律保持不变，这种空间平移不变性必然导致动量守恒.

三维空间的纯转动的坐标变换为

$$\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r}' = g\boldsymbol{r}, \tag{4.5.2}$$

其中 g 表示一转动矩阵，比如绕 z 轴的转动，可以表示为

$$g = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{4.5.3}$$

体系在具有空间转动不变性时，其角动量守恒.

时间平移变换可表示为

$$t \to t' = t + \tau, \tag{4.5.4}$$

体系在具有时间平移不变性时，其能量守恒. 体系的动量、角动量和能量守恒，是物理学中的三个基本的守恒定律. 这些守恒定律表明，所有的物理规律在任何地方、任何时间都是相同的. 而且与空间取向无关. 如果不存在这些守恒定律，自然界的规律将随时间地点而变，实验结果不能重复，科学也就不存在了.

不连续时空对称性

空间反射是指 $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$ 的变换，物理规律在空间反射下的不变性将导致宇称守恒. 时间反演定义为

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) \to \psi(\boldsymbol{r}, -t), \tag{4.5.5}$$

时间反演不变性要求一个反应的正、逆向过程进行时跃迁振幅相等，称为倒易定理，或细致平衡原理. 当然时间反演不变性还可以推导出质子和中子的许多性质，比如如果时间反演不变性成立，则能导出中子不具有电偶极矩. 实验证明中子的电偶极矩小于 $6\times10^{-25}\ e\cdot\text{cm}$，因此时间反演不变性受到考验.

4.5.2 正反粒子变换

粒子和反粒子

狄拉克的空穴理论给出了反粒子的概念. 1932 年在宇宙射线中发现了正电子，证实了狄拉克的预言. 1956 年张伯伦等人在美国伯克利加速器实验室发现了反质子，即质量与自旋和质子相同，但带有一个单位负电荷的粒子，接着又发现了反中子. 反中子的质量和自旋都和中子相同，但磁矩是正的. 后来发现，所有粒子都有相应的反粒子. 继续使用狄拉克空穴模型理论解释所有粒子和反粒子是不行的. 空穴理论对玻色子是不适用的. 后来有人引入了一种看待反粒子的不同方法：认为负能态表示在时间上反向运动的粒子. 这样不需要假设有负能海，也不需要只限于费米子. 按照量子场论提供的物理图象，场的激发态表现为粒子，场的任一种激发态都有与之对应的复共轭的激发态，这在物理上相应于粒子和反粒子. 粒子和反粒子的质量、寿命和自旋相同，但它们的一切内部相加性守恒量都互相反号. 也有可能某些粒子的一切内部相加性守恒量都为零，反粒子就是它

自己.这种粒子称为纯中性粒子.光子和 π^0 介子就是纯中性粒子.是否存在没有反粒子的粒子?中微子就是这样的粒子,中微子并没有上面含意下的反粒子,反中微子的含意与此不同.

C **变换**

把粒子变成反粒子变换称为反粒子变换或电荷共轭变换.简称为 C 变换.

$$C|b,Y,Q,I_3,L_e,L_\mu,L_\tau,\cdots,\boldsymbol{p},\boldsymbol{J}\rangle$$
$$=\eta_c^*|-b,-Y,-Q,-I_3,-L_e,-L_\mu,-L_\tau,\cdots,\boldsymbol{p},\boldsymbol{J}\rangle, \tag{4.5.6}$$

其中重子数 b、超荷 $Y=S+b$、电荷 Q、同位旋第三分量 I_3、轻子数 L_e、L_μ 和 L_τ 等为内部相加性守恒量.η_c^* 是一个相因子.作用于粒子态 ψ 上满足方程的态 ψ 称为算符 C 的本征态.常数 C' 称为 C 的本征值.显然有:

$$C^2\psi=CC\psi=CC'\psi=C'C\psi=C'C'\psi=C'^2\psi=\psi, \tag{4.5.7}$$

因此:

$$C'^2=1,\quad C'=\pm 1. \tag{4.5.8}$$

所以,C 的本征值只能是 $+1$ 或 -1.称为粒子的电荷宇称或 C 宇称.实验表明,强相互作用和电磁相互作用过程在 C 变换下不变.

纯中性粒子在 C 变换下是不变的,因此纯中性粒子具有确定的 C 宇称,可以为 $+1$ 或 -1,取决于描述该粒子运动状态的场量在 C 变换下是不是变号,光子是纯中性粒子,是电磁场的量子,在 C 变换下,一切电荷电流都变号,描述光子运动状态的场量 $\boldsymbol{A}$ 也就随着变号,因此光子的 C 宇称为负.对于光子有

$$C|r\rangle=-|r\rangle, \tag{4.5.9}$$

π^0 介子不带电荷,是纯中性粒子,可衰变成两个光子,这是电磁相互作用过程,应在 C 变换下不变.

$$C|\pi^0\rangle=C(|r\rangle|r\rangle)=(C|r\rangle C)|r\rangle=(-|r\rangle)(-|r\rangle)$$
$$=|r\rangle|r\rangle=|\pi^0\rangle, \tag{4.5.10}$$

它的 C 宇称为 $+1$.

根据 C 宇称在电磁相互作用过程下不变，π^0 介子的 C 宇称为正，光子的 C 宇称为负，可以断定 π^0 介子不可能衰变成 3 个光子.

多个粒子组成的系统在 C 变换下系统的组成不变时为一个纯中性系统. 纯中性系统是否具有确定的 C 宇称，还取决于系统的时空结构性质. 一个最重要的常见的纯中性系统是一对正反粒子组成的系统，如果这一对正反粒子的自旋之和为 S，正反粒子之间的相对轨道角动量为 L，则理论上已普遍推出：不论组成系统的正反粒子是费米子还是玻色子，这个纯中性系统的 C 宇称为

$$C' = (-1)^{L+S}. \tag{4.5.11}$$

由电子和正电子组成的电子偶素(e^+e^-)，若轨道角动量 $L=0$，总自旋 S 还可以有两个值：

$S=0$，这时 $C'=+1$，可以衰变到 $\gamma\gamma$，但不能衰变到 $\gamma\gamma\gamma$；

$S=1$，这时 $C'=-1$，可以衰变到 $\gamma\gamma\gamma$，但不能衰变到 $\gamma\gamma$.

反物质

欧洲核子研究中心 2000 年 8 月 10 日宣布，它建造的反质子减速器已经投入使用. 这一“反物质工厂”将帮助科学家进一步探索反物质之谜，揭示宇宙诞生和演化以及物质世界构成等奥秘.

物质是由分子和原子组成，原子是由带负电的电子和带正电的原子核组成，如果由带正电的电子与带负电的原子核组成原子，那么就是反原子，由反原子就可组成反物质.

科学家认为，约 150 亿年前宇宙诞生时产生了大体相等的物质和反物质，那么现在这些反物质到哪里去了?一种解释说在宇宙的某些地方存在着由反物质组成的星系；还有一种解释说宇宙诞生时产生的物质比反物质多了一点，物质与反物质相互湮灭后，剩下的物质就构成了现在的宇宙. 由于科学家目前对反物质了解非常少，因此对宇宙诞生和演化以及物质世界构成等问题很难深入研究.

为了探索反物质之谜，目前科学家采取了两种途径，一是在自然界中寻找反物质，研究反物质的自然状态；二是在实验室中制造反物质，从更多的角度研究反物质. 1997 年 4 月，美国海军研究实验室、西北大学和加州大学伯克利分校等五个著名研究机构的天文学家宣布，他们利用先进的伽马射线探测卫星发现在银河系上方约 3500 光

年处有一个不断喷射反物质的反物质源.它喷射出的反物质在宇宙中形成了一个高达 2940 光年的“喷泉”.这是宇宙反物质研究领域的一个重大突破.

1998 年 6 月 2 日,美国“发现”号航天飞机携带阿尔法磁谱仪发射升空.这一核心部分由中国科学家制造的仪器,是当代最先进的粒子物理传感仪,目的是去太空寻找反物质.阿尔法磁谱仪这次随“发现”号上天,尽管没有发现反物质,但采集存贮了大量数据.2002 年它将被送上国际空间站,进行长达 3 年的数据采集工作.它对反物质的探索,很可能带来一次科学突破.

在自然界中寻找反物质难度很大,而且很难进一步研究它的性质,因此近年来科学家尝试在实验室中制造反物质.1995 年欧洲核子研究中心的科学家在世界上制成了第一批反物质——反氢原子,揭开了人类研制反物质的新篇章.科学家利用加速器,将速度极高的负质子流射向氙原子核,以制造反氢原子.由于负质子与氙原子核相撞后会产生正电子,刚诞生的一个正电子如果恰好与负质子流中的另外一个负质子结合就会形成一个反氢原子.在累计 15 小时的实验中,他们共记录到 9 个反氢原子存在的证据.由于这些反氢原子处在正物质的包围之下,因此它们的寿命极短,平均为 30 纳秒.1996 年,美国费米国家加速器实验室成功制造了 7 个反氢原子.此后,在实验室中制造反物质的工作受到很多科学家的高度重视.

4.5.3 P 变换

P 变换

定义空间坐标都反号但时间不反号的变换为 P 变换:

$$P\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi(-\boldsymbol{r},t), \tag{4.5.12}$$

在 P 变换下

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}\rightarrow(-\boldsymbol{x})\times(-\boldsymbol{p})=\boldsymbol{L}, \tag{4.5.13}$$

因此轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 在 P 变换下不变.

轨道宇称和内禀宇称

P 变换满足:

$$P^2\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi(\boldsymbol{r},t),\tag{4.5.14}$$

所以宇称算符 P 的本征值只能是 $+1$ 或 -1. 相应地称为偶宇称和奇宇称. 当系统轨道角动量为 L 时, 其本征函数为 $Y_{Lm}(\theta,\phi)$, 在 P 变换下 $r\to r,\theta\to\pi-\theta,\phi\to\pi+\phi$, 因此有

$$PY_{Lm}(\theta,\phi)=Y_{Lm}(\pi-\theta,\pi+\phi)=(-1)^L Y_{Lm}(\theta,\phi),\tag{4.5.15}$$

即这时的 P 宇称值为 $P'=(-1)^L$, 称为轨道宇称.

粒子物理中一般需要考虑粒子数是可变的, 因此必须同时考虑粒子内部波函数在 P 变换下的性质. 在 P 变换下粒子内部波函数还有一定的宇称, 称为内禀宇称, 又称为粒子的宇称. 这种宇称与现在还不清楚的粒子内部运动的对称性有关, 不能像轨道角动量那样给出明显的表达式, 只能根据 P 宇称守恒的要求从实验上确定.

相对宇称和绝对宇称

既然内禀宇称只能根据 P 宇称守恒定律的要求来确定, 它就具有相对性. 只有纯中性粒子才具有绝对的内禀宇称. 凡是内部相加性量子数皆为零的粒子称为纯中性粒子, 又称马约拉纳粒子. 纯中性粒子的反粒子就是粒子本身. 纯中性粒子有 γ 光子、π^0、ρ^0、η、ω 和 ϕ 粒子等. 由于纯中性粒子可以单独产生或湮灭, 因此由实验可以完全确定其内禀宇称. 光子和 π^0 介子的内禀宇称为 -1.

对于非纯中性粒子, 由于相加性量子数的守恒定律, 它们只能成对地产生和湮灭. 因此对于它们只能确定其相对内禀宇称. 对于非纯中性粒子的内禀宇称 π 作如下规定:

(1) 对于核子, $\pi_N=+1$;

(2) 对于奇异粒子, $\pi_K=-1,\pi_\Lambda=+1$;

(3) 对于同一组的同位旋多重态的粒子有相同的内禀宇称, 如 $\pi^\pm$ 介子的内禀宇称也是 -1;

(4) 正反费米子有相反的内禀宇称, 正反玻色子有相同的内禀宇称. 一对由正反粒子组成的纯中性体系具有确定的宇称:

$$\text{正反费米子系统:}\quad \pi=(-1)^{L+1},$$

$$\text{正反玻色子系统:}\quad \pi=(-1)^L,$$

其中 L 为正反粒子相对运动的轨道角动量.

对于只参加弱相互作用的中微子，因为宇称在弱相互作用中不守恒，因此无法确定. 对于 e^+ 和 e^-、μ^+ 和 μ^-、τ^+ 和 τ^- 轻子的内禀宇称，没有作出明确的规定，但它们都是费米子，因此由它们组成的纯中性系统对第(4)条规定都是适用的.

弱相互作用中的宇称不守恒

1956 年实验上发现了两个粒子 θ^+ 和 τ^+，它们的衰变行为、质量和寿命分别为

$$\begin{aligned} &\theta^+ \to \pi^+ + \pi^0, \quad m = (966.7 \pm 2)m_e, \\ &\tau = (1.21 \pm 0.02) \times 10^{-8}\,\text{s}; \\ &\tau^+ \to \pi^+ + \pi^+ + \pi^-, \quad m = (966.3 \pm 2)m_e, \\ &\tau = (1.19 \pm 0.02) \times 10^{-8}\,\text{s}. \end{aligned} \tag{4.5.16}$$

实验显示它们的质量和寿命在误差范围内相等. 一个自然的解释为：θ^+ 和 τ^+ 实际上是同一种粒子的不同衰变方式. 当时已经知道 π 介子的自旋和宇称为 $J^P=0^-$，2 个 π 介子的总自旋角动量为零，宇称为正；3 个 π 介子的总自旋角动量为零，宇称为负. 如果宇称在弱相互作用过程中是守恒量，则 θ^+ 和 τ^+ 就不可能是同一种粒子. 这就是 θ-τ 疑难.

1956 年杨振宁和李政道全面分析了与 θ-τ 疑难有关的实验和理论后提出，这个疑难的关键在于认为微观粒子的运动过程中宇称是守恒的. 他们指出，在强相互作用和电磁相互作用过程中宇称守恒是得到了实验判定性的检验的，但是在弱相互作用过程中宇称守恒只不过是人们的推想而被当然地接受，并没有得到实验判定性的检验. θ-τ 疑难产生的原因可能在于弱相互作用过程中宇称可以不守恒. 他们大胆地提出了弱相互作用过程中宇称不守恒的假说. 他们进一步建议可以通过 ^{60}Co 的 β 衰变实验来对这一点进行判定性检验. ^{60}Co 的 β 衰变为：

$$^{60}\text{Co} \to {}^{60}\text{Ni} + e^- + \bar{\nu}_e. \tag{4.5.17}$$

1957 年吴健雄进行了这一实验[①]，第一个证明了弱相互作用中宇称的确是不守恒的. 为了了解吴健雄的实验，先分析一下如果在 β

① C. S. Wu, *et al.*, *Phys. Rev.*, **105** (1957)1413.

衰变中宇称不守恒会出现什么现象.假设发生β衰变的原子核是极化的,即它们的自旋大都沿同一方向,例如自旋都向上,这时它们的镜像也是自旋向上的.如果原子核以一定的概率向上发射β粒子,即β粒子的运动方向和核的自旋取向相同,则其镜像以相同的概率向下发射β粒子,即β粒子的运动方向和核的自旋取向相反.如果β衰变是宇称守恒的,则互为镜像的两个过程都能够实现,沿自旋方向相同和相反方向发射β粒子的数目一样;如果β衰变是宇称不守恒,则沿自旋方向相同和相反方向发射β粒子的数目就会不一样.吴健雄将^{60}Co源放在极低温(0.01 K)环境,加上几百高斯的外磁场,^{60}Co原子核的自旋基本上都朝向外磁场方向.考虑衰变出的电子动量在极化^{60}Co核自旋方向的投影p_J,这是一个赝标量,它在空间反射变换下是变号的.如果弱相互作用过程中宇称是守恒的,在$p_J>0$方向和$p_J<0$方向飞出的电子数应相等.实验结果表明,向与钴核自旋相反方向飞出的电子比与钴核自旋相同方向飞出的电子多40%.清楚地表明,弱相互作用过程中宇称守恒不再保持了.

在弱相互作用中宇称不守恒曾受到很多人的反对,泡利在知道进行极化^{60}Co原子核β衰变实验的设想时,在给韦斯科夫的一封信中写道:"我不相信上帝会在弱作用中偏向左手,我敢打一笔很大赌注的赌:实验将给出电子对称的角分布,我看不到在相互作用强度和镜像不变性间有任何逻辑联系."但是实验证明了这种看来似乎正确的理论却是错误的.正如爱因斯坦所说:"一个矛盾的实验结果就足以推翻一种理论."吴健雄的实验结果发表后,泡利说:"幸亏没有人同我打赌,否则我就破产了,现在我只损失了一点荣誉,不过不要紧,我的荣誉已经够多了."杨振宁和李政道因为他们的杰出工作获得了1957年诺贝尔物理学奖.

4.5.4 *CPT* 定理

CPT 变换

在C、P、T变换时,各种物理量的变换关系如表4.5.1①.

① 章乃森,粒子物理学,上册,科学出版社,1986,p265.

表 4.5.1

物理量	C	P	T
$\boldsymbol{r}$	$\boldsymbol{r}$	$-\boldsymbol{r}$	$\boldsymbol{r}$
t	t	t	$-t$
$\boldsymbol{p}$	$\boldsymbol{p}$	$-\boldsymbol{p}$	$-\boldsymbol{p}$
$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$	$\boldsymbol{L}$	$\boldsymbol{L}$	$-\boldsymbol{L}$
$\boldsymbol{\sigma}$	$\boldsymbol{\sigma}$	$\boldsymbol{\sigma}$	$-\boldsymbol{\sigma}$
$\boldsymbol{E}$	$-\boldsymbol{E}$	$-\boldsymbol{E}$	$\boldsymbol{E}$
$\boldsymbol{B}$	$-\boldsymbol{B}$	$\boldsymbol{B}$	$-\boldsymbol{B}$
Q	$-Q$	Q	Q
$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$	$-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$	$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$	$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$
$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{E}$	$-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{E}$	$-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{E}$	$-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{E}$
$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$	$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$	$-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$	$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$

CPT 定理

在量子场论中，施温格、泡利、吕德斯(G. Luders)和祖米诺(B. Zumino)证明了一个基本定理即 CPT 定理，这个定理给出：如果(1) 所讨论的场是定域场，即场所对应的粒子是点粒子；(2) 场具有相对论所要求的正洛伦兹协变性；(3) 满足自旋统计关系，则运动规律在 CPT 联合变换下必然也是不变的，即使它在 C、P 和 T 的单独变换下有改变. CPT 定理的一个重要的直接推论是：粒子和反粒子的质量、寿命、自旋磁矩的 g 因子都完全相同，并且粒子的某一衰变道的衰变速率和 C 变换后反粒子的相应的衰变道的衰变速率相等. CPT 定理在相当高的精度下为实验所证实. 由于 CPT 定理成立的三个条件都是相当基本的，一般总是能够满足的.

弱相互作用的 CP 不变性

1957～1958 年建立的普适费米弱相互作用理论指出，弱相互作用中 C 宇称也可以不守恒，但是弱相互作用具有 CP 不变性. CP 不变性的物理含意为：两个通过 CP 变换相联系的过程，其演化性质和概率分布完全相同. 要特别强调的是，由于中微子不直接参与强相互作用和电磁相互作用，但可以直接参与弱相互作用，中微子和反中微子之间不是由 C 变换联系，而是由 CP 变换联系，表现为中微子是左旋就决定了反中微子是右旋，实验很好地验证了这个预言. 弱相互作用下 CP 变换不变性在相当好的近似下保持，但在某些弱相互作

用过程中观察到有约千分之几的 CP 破坏效应.

1964 年克罗宁(W. Cronin)和菲奇(V. L. Fitch)等人发现 K^0 介子的 CP 守恒也有问题. 为此他们获得了 1980 年诺贝尔物理学奖. 至今只有在 K^0 介子衰变时破坏 CP 守恒律. 由于 CP 只是近似守恒,有少量 CP 不守恒的成分,$|K_S\rangle$ 和 $|K_L\rangle$ 的表达式中叠加系数有微小差别,可以写成:

$$|K_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1+|\varepsilon|^2)}}((1+\varepsilon)|K^0\rangle - (1-\varepsilon)|\overline{K}^0\rangle), \tag{4.5.18}$$

$$|K_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1+|\varepsilon|^2)}}((1+\varepsilon)|K^0\rangle + (1-\varepsilon)|\overline{K}^0\rangle), \tag{4.5.19}$$

ε 是复参数,实验测得

$$|\varepsilon| = (1.630 \pm 0.083) \times 10^{-3}. \tag{4.5.20}$$

4.5.5 粒子物理中的守恒量

粒子物理中的守恒量

能量、动量、角动量、电荷等都是有经典对应的守恒量,有经典对应的守恒量都是相加性守恒量,即一个复合体系的总守恒量是各组成部分所贡献的该守恒量的代数和. 同位旋、奇异数、粲数、底数、顶数、轻子数、重子数等都是无经典对应的相加性守恒量. P 宇称、C 宇称、CP 宇称都是无经典对应的相乘性守恒量,即一个复合体系的总守恒量是各组成部分所贡献的该守恒量的乘积. 相乘性守恒量都是无经典对应的守恒量.

如果一个守恒定律对各种相互作用都成立,则称为严格守恒定律;如果一个守恒定律对某些相互作用成立,但对另一些相互作用不成立,并且在运动过程中后者影响是次要的,则称为近似守恒定律,或部分守恒定律. 能量、动量、角动量、电荷等都是有经典对应的相加性严格守恒量,同位旋、奇异数是无经典对应的相加性近似守恒量. P 宇称、C 宇称、CP 宇称是无经典对应的相乘性近似守恒量.

同位旋

在同位旋空间中,也可以选定一个特殊方向,同位旋为 I 的粒子,其同位旋在这特殊方向(通常称为第三方向)的投影 I_3 的可取值为 $I, I-1, \cdots, -I+1, -I$,共 $2I+1$ 个值,这和角动量完全相同. 由于同位旋把不同电荷的粒子统一起来,因此可以规定 I_3 的本征态也就是电荷取确定值的态. 同一同位旋多重态内不同 I_3 本征值的改变等于电荷的改变. 在强相互作用中同位旋和 I_3 守恒,在电磁相互作用中 I_3 守恒.

重子数和轻子数

如果规定重子的重子数 b 都是 1,则所有反重子的重子数为 -1. 轻子、光子和介子的重子数为零. 在各种衰变和反应前后重子数之和守恒. 质子是最轻的重子,所有重子都会最终衰变为质子. 如果质子可以衰变,重子数就不再守恒了. 实验测定质子寿命的下限为 $10^{31} \sim 10^{32}$年. 至今违背重子数守恒的反应过程是严格禁止的.

轻子数分为电子轻子数 L_e、μ 子轻子数 L_μ 和 τ 子轻子数 L_τ. 规定 e^- 和 ν_e 的轻子数 L_e 为 1,μ^- 和 ν_μ 的轻子数 L_μ 为 1,τ^- 和 ν_τ 的轻子数 L_τ 为 1;它们的反粒子相应的轻子数为 -1. 其他粒子的轻子数为零. 在各种衰变和反应前后轻子数之和守恒.

奇异数和盖耳曼-西岛关系

核子和 π 介子等强子统称为普通强子,普通强子和光子、电子、μ 子、τ 子、中微子以及它们的反粒子等合起来统称为普通粒子. 不同于普通粒子,奇异粒子协同产生,独立衰变,并且是快产生、慢衰变. 1953 年西岛和彦(K. Nishijima)提出了奇异量子数 S 的概念,认为所有粒子都有确定的奇异数 S. 规定所有普通粒子的奇异数 $S=0$,首先由反应:

$$\pi^- + p \rightarrow \Lambda^0 + K^0 \tag{4.5.21}$$

来规定奇异粒子的奇异数. 当初规定 Λ^0 的奇异数 $S=-1$,K^0 的奇异数 $S=1$. 然后再由其他反应确定其他粒子的奇异数.

在强相互作用和电磁相互作用过程中,奇异数 S 守恒. 在弱相互作用过程中,奇异数 S 可以不守恒. 强相互作用过程中奇异数守恒决定了末态中奇异粒子必须协同产生,这样才能使产生的奇异粒

子的奇异数互相抵消. 奇异粒子的衰变是通过弱相互作用实现的过程，每一个奇异粒子可以独立地衰变为几个普通粒子，所需时间较长，不再要求奇异数守恒了.

1955 年盖耳曼（M. Gell-Mann）和西岛和彦提出强子的电荷 Q、同位旋沿第三方向的投影 I_3、重子数 b 和奇异数 S 满足下列关系：

$$Q = I_3 + \frac{1}{2}(b + S) = I_3 + \frac{1}{2}Y. \qquad (4.5.22)$$

这就是盖耳曼-西岛关系. $Y=b+S$ 称为超荷. 这一关系刚提出时，Σ^0、Ξ^0 和 Ω^- 等粒子还没有发现，在这一关系的预言下陆续发现了这些粒子. 盖耳曼-西岛关系有如下推论：

(1) 凡是 Y 为偶数的粒子其同位旋 I 必为整数；凡是 Y 为奇数的粒子其同位旋 I 必为半整数.

(2) 对于同一个同位旋多重态的所有粒子，其电荷的平均值为 $Y/2$.

(3) 在强子参与的电磁相互作用中由于 B、S、Q 等量子数守恒，I_3 也守恒，I 的选择定则为 ΔI 等于整数(包括零)，不可能为半整数.

(4) 如果粒子进行弱衰变后末态都是强子，则由于 S 不守恒，I_3 和 I 也不守恒. 有选择定则 $\Delta S=\pm1$.

1974 年发现了粲数 C，1977 年发现了底数 B，1995 年发现了顶数 T，都是属于类似于奇异数的这类量子数. 盖耳曼-西岛关系已经推广为：

$$Q = I_3 + \frac{1}{2}(b + S + C + B + T). \qquad (4.5.23)$$

到目前为止还没有发现已知强子不符合这一关系的.

到目前为止，对强、弱、电磁相互作用皆适用的守恒定律共有九种：即能量 E、动量 p、角动量 J、电荷 Q、重子数 b、电子轻子数 L_e、μ 子轻子数 L_μ、τ 子轻子数 L_τ 和 CPT. 通过守恒量的研究可以分析相互作用过程是属于什么类型的相互作用. 另外，不守恒并不是表明过程一定不能产生，在满足一定的条件(选择定则)下，过程也是可以发生的. 在电磁相互作用中同位旋 I 不守恒，若没有轻子参加，满足

$|\Delta I|=1$，过程即可产生. 在弱相互作用过程中 I 和 I_3 都不守恒，在没有轻子参加时，满足 $|\Delta I|=1/2$，$|\Delta I_3|=1/2$，过程也可产生.

表 4.5.2 给出三种相互作用下的守恒定律. "+"表示守恒定律成立，"−"表示守恒定律受到一定程度的破坏.

表 4.5.2

	能量 E	动量 p	角动量 J	电荷 Q	电子轻子数 L_e	μ子轻子数 L_μ	τ子轻子数 L_τ	重子数 b	同位旋 I	同位旋分量 I_3	奇异数 S	宇称 P	电荷共轭 C	时间反演 T	联合变换 CPT
强相互作用	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
电磁相互作用	+	+	+	+	+	+	+	+	−	+	+	+	+	+	+
弱相互作用	+	+	+	+	+	+	+	+	−	−	−	−	−	−	+

例题 4.5.1　试判断下列质子轰击 K^- 的反应：

$$K^- + p \rightarrow \Omega^- + K^+ + K^0$$

能否发生，属于哪类相互作用？（已知终态系统轨道角动量量子数 $L=1$）.

解　判断此过程能否发生，要从守恒定律考虑. 题设中未给出的具体条件和反应中不出现的可视为自然满足. 如本题中的能量、动量、轻子数等. 为了便于讨论，将各粒子的有关量子数列表如下：

	Q	J	B	I	I_3	S	P
K^-	−1	0	0	1/2	−1/2	−1	−1
p	+1	1/2	1	1/2	+1/2	0	+
…………							
Ω^-	−1	3/2	1	0	0	−3	+
K^+	+1	0	0	1/2	+1/2	1	−
K^0	0	0	0	1/2	−1/2	1	−

(1) 电荷守恒满足：$-1+1=-1+1+0=0$.

(2) 角动量守恒：反应前为 3/2，考虑到题设中的已知终态系统轨道角动量量子数 $L=1$，反应后角动量可取 5/2，3/2 和 1/2，因此角动量守恒.

(3) 重子数守恒：反应前后重子数都是 1，故守恒.

(4) 奇异数守恒.

(5) P 宇称守恒要求：$\pi_a\pi_b(-1)^l=\prod_i\pi_i(-1)^{l'}$，其中 $\pi_a\pi_b$，l 为反应前两个粒子的内禀宇称和轨道角动量，π_i 和 l' 为反应后第 i 个粒子的内禀宇称和轨道角动量. 因此宇称守恒.

综上所述，推断该过程可以发生. 此过程中有奇异粒子协同产生，同位旋守恒，必然是强相互作用.

习　题

4.5.1　重子 Ω^- 的奇异数 $S=-3$，(1) 在 K^- 束轰击质子产生 Ω^- 的反应中，还有哪些粒子产生？(2) Ω^- 粒子将如何衰变？

4.5.2　试由同位旋守恒来分析能否发生下列两个反应：

$$p+p\to\pi^++D \quad 和 \quad n+p\to\pi^0+D.$$

4.5.3　已知粒子 Ξ^- 的同位旋 $I=1/2$，奇异数 $S=-2$，在实验中观测到下面的衰变方式：

$$\Xi^-\to\Lambda^0+\pi^-$$

试分析同位旋和奇异数的守恒情况，并说明这是由哪种相互作用引起的衰变.

4.6　强子的结构

4.6.1　强子的对称性和超多重态

在已经发现的几百个粒子中，只有少数是规范玻色子和轻子，绝大多数是强子. 在实验精度达到 10^{-18} m 时，轻子仍然表现为点粒子. 在电子-强子的高能散射中观测到了强子的电荷分布，许多强子都存在反常磁矩，显示许多强子在 10^{-15} m 精度内就是有结构的. 对于强子结构的研究是从它们的对称性入手的. 属于同一同位旋多重态的强子有近似的质量、完全相同的自旋和宇称等量子数，只是有不同的电荷. 不同的质量是由电磁相互作用引起的. 忽略电磁相互作用它们的质量完全相同. 因此可以认为属于同一同位旋多重态的强子是同种粒子. 除同位旋，强子还可以按奇异数分类，不同奇异数的同位旋多重态可以组合成更高对称性的超多重态. 强子的结构就是按

照这个思路研究的.

费米-杨振宁模型

最简单的同位旋多重态是$I=1/2$的费米子多重态,最简单的$I=1/2$费米子是质子、中子和它们的反粒子. 50年代中期以前,多数物理学家认为质子、电子、中子、π介子以及μ子是"基本粒子". 1949年费米和杨振宁提出了强子的结构模型,认为质子、中子和它们的反粒子是构成其他粒子的基本单元. π介子是由核子和反核子构成的:

$$p+\bar{n}\to\pi^+,\quad n\bar{n}-p\bar{p}\to\pi^0,\quad n+\bar{p}\to\pi^-,\qquad(4.6.1)$$

但是这个模型不能解释奇异粒子的组成.

坂田模型

1956年坂田昌一为了解释奇异粒子的组成,将组成粒子的基本单元扩充为质子、中子、Λ超子和它们的反粒子. 认为所有强子都是由质子、中子和Λ超子和它们的反粒子所组成. 坂田成功地解释了介子组成,例如π介子的组成与费米-杨振宁模型相同,K介子的组成为:

$$p+\bar{\Lambda}\to K^+,\quad \Lambda+\bar{p}\to K^-,\quad n+\bar{\Lambda}\to K^0,$$
$$\bar{n}+\Lambda\to\bar{K}^0,\qquad(4.6.2)$$

但是对重子的分类却解释得不好. 要组成重子数为1的费米子,必须用两个基本粒子和一个它们的反粒子,例如Σ^-由$n,\Lambda,\bar{p}$构成. 但是从对称性考虑,核子(n,p)与超子Λ,Σ,Ξ有性质上的相似,用群论语言说,它们属于对称群的一个"表示". 然而在坂田模型中,它们不属于一个家族.

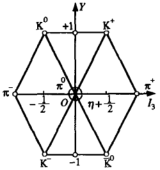
同位旋多重态

50年代中期,盖耳曼研究粒子的分类问题. 他将介子与重子分别按自旋J和宇称P分成几个"多重态". 在一个多重态中的粒子又可以按同位旋分量I_3及奇异数S归类. 以赝标介子$J^P=0^-$和$J^P=\frac{1}{2}^+$为例,它们都是八重态,如图4.6.1所示:

强相互作用的同位旋对称性表现以下特点:

(1) 每个不可约表示用参量I来标志;

(2) 不可约表示中的不同分量用参量I_3来标志和区分,不可约



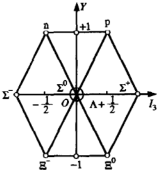


图 4.6.1　0^-介子的八重态和$\frac{1}{2}^+$重子的八重态

表示给定，则其各分量的 I_3 值也就确定了；

(3) 粒子按不可约表示分类，每个粒子对应不可约表示的一个分量；

(4) 属于同一个不可约表示的各粒子的自旋宇称 J^P 相同；

(5) 属于某一个不可约表示的一个粒子存在，则属于这个不可约表示的所有粒子都存在；

(6) 属于同一个不可约表示的各粒子的质量 m 相同；

(7) 属于同一个不可约表示的各粒子的寿命 τ 相同.

同位旋对称性是一个近似的对称性，实际上有少量的破缺，当考虑对称性破缺时，上面的前 5 条完全不变，后两条则随对称性破缺的增加而连续变化，即属于同一个不可约表示的各粒子的质量和寿命可以有所差异.

同位旋的对称性是用一个 $SU(2)$群来描写的，奇异数对称性是用一个 $SU(1)$群来描写的. 如果在同位旋 I 和奇异数 S 的基础上，确有更高的对称性，可以期望对于这更高的对称性有：

(1) 每个不可约表示用适当的参量来标志；

(2) 不可约表示中的不同分量用参量 I, I_3 和 S 来标志和区分，一旦不可约表示给定，则其各分量的 I, I_3 和 S 值也确定.

(3)～(7)和同位旋对称性的情况完全相同. 它们之间的差别在于：同位旋对称性的破缺直接表现在同一同位旋多重态中，各粒子的质量随 I_3 的值不同而不同，破缺部分约占 1%的量级；更高的对称

性的破缺直接表现在不同多重态中，各粒子质量随 I、I_3 和 S 值的不同而不同，破缺的部分所占比例远大于 1%的量级. 因此要寻找的是相当程度上破缺了的对称性.

以同位旋和奇异数为基础的更高的对称性如果用群 G 来描写，那么 G 群应该包含 $SU(2)$群、$SU(1)$群的直乘为其子群：

$$G \supset SU(2) \times SU(1), \tag{4.6.3}$$

然而满足这个要求的群有无穷多个.

同位旋多重态和超多重态

利用群论的结果，60 年代发现了几个 $J^P=\frac{3}{2}^+$ 的重子，它们是：

$$\begin{array}{lll} I=\frac{3}{2}, Y=1 & \Delta^{++}, \Delta^{+}, \Delta^{0}, \Delta^{-} & m=1232 \text{ MeV} \\ I=1, Y=0 & \Sigma^{*+}, \Sigma^{*0}, \Sigma^{*-} & m=1385 \text{ MeV} \\ I=\frac{1}{2}, Y=-1 & \Xi^{*0}, \Xi^{*-} & m=1530 \text{ MeV} \end{array} \tag{4.6.4}$$

从自旋、宇称和质量来看，它们应属于同一个不可约表示，但是它们对超荷 $Y=b+S$ 的正值和负值不是对称的，盖耳曼选择一个更大的群将具有不同同位旋多重态都归纳进去. 用两个量子数来表征粒子，他发现 $SU(3)$群最合适. 只有 $SU(3)$群可以有对于 Y 的正值和负值不对称的不可约表示存在. 因此更高的对称性只能是 $SU(3)$群对称性. 它们组成同位旋的超多重态. 在上述 $J^P=\frac{3}{2}^+$ 的粒子中，$I=\frac{3}{2}, Y=1, I=1, Y=0, I=\frac{1}{2}, Y=-1$ 和 $I=0, Y=-2$ 四个同位旋多重态组成超多重态.

一个多重态就是群的一个表示，一个多重态的粒子性质极为相似，它们的电磁相互作用和弱相互作用可以通过对称性作出预言，如果对称性是完全的，同一个多重态中粒子的质量应该相同，但实际上并非如此，说明 $SU(3)$群对称性是破缺的. 盖耳曼对于对称性破缺作了一个简单的假定，得出了质量公式，给出了同一个多重态中不同粒子质量的关系. 现在称为盖耳曼-大久保公式. 它和实验符合得很好. 当时已经发现了 $J^P=\frac{3}{2}^+, I=\frac{3}{2}$ 的四个重子共振态 $\Delta^-, \Delta^0, \Delta^+, \Delta^{++}$，质量 1238 MeV. 盖耳曼分析指出，它们应该属于 $SU(3)$群的

十重态表示. 如图 4.6.2 所示.

但是十重态中还应该有 $I_3=1$, $\frac{1}{2}$, 0 三种同位旋多重态的六个粒子, 当时还没有发现. 1962 年发现了这六个粒子中的五个: Σ^{*-}, Σ^{*0}, Σ^{*+}, Ξ^{*-}, Ξ^{*0}, 只剩下一个 $I_3=0$, $S=-3$ 的 Ω^- 粒子了. 盖耳曼预言它的质量为 1685 MeV, 也给出了它的衰变模式. 由于奇异粒子衰变中奇异数只能变化 1, 因此奇异数 $S=-3$ 的 Ω^- 粒子必须先衰变到 $S=-2$ 的 Ξ^{*-}, Ξ^{*0} 粒子, 再衰变到 $S=-1$ 的 Σ^{*-}, Σ^{*0}, Σ^{*+} 粒子, 最后衰变到 $S=0$ 的核子. 1961 年奈曼(Y. Ne'eman)也提出 $SU(3)$ 群的理论.

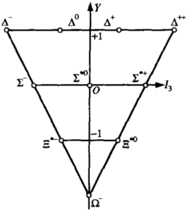


图 4.6.2 $\frac{3}{2}^+$ 重子的十重态

盖耳曼-大久保质量公式

在同一超多重态中, 属于同一同位旋多重态的粒子, 它们的质量相差很小, 约在 1% 以内, 约几个 MeV, 这可能是电磁相互作用引起的. 但是在不同奇异数的各同位旋多重态的粒子之间, 质量差就比较大. 考虑到粒子质量与同位旋和奇异数相关, 盖耳曼等提出了参数化的质量公式:

$$m = m_0 + \Delta m_1 Y + \Delta m_2 [I(I+1) - Y^2/4], \quad (4.6.5)$$

称为盖耳曼-大久保质量公式. 其中 m_0, Δm_1, Δm_2 为参数, 对不同的超多重态有不同的值.

对于 $\frac{1}{2}^+$ 重子八重态, 可以得到:

$$(m_N + m_\Xi)/2 = (3m_\Lambda + m_\Sigma)/4, \quad (4.6.6)$$

实验值为

$$\begin{aligned} (m_N + m_\Xi)/2 &= 1128 \text{ MeV}, \\ (3m_\Lambda + m_\Sigma)/4 &= 1135 \text{ MeV}, \end{aligned} \quad (4.6.7)$$

误差在 1% 以内.

Ω^-粒子的发现

$SU(3)$理论预言十维表示中尚未发现的第十个 $J^P=\frac{3}{2}^+$ 重子即 Ω^- 粒子，其基本性质应为 $b=1, I=0, S=-3, Q=-1, m=1678.4$ MeV，$\tau\sim10^{-10}$ s. 这个预言很使人兴奋，因为十维表示中已发现的九个粒子都是不稳定的，它们的寿命都很短，为 10^{-23} s～10^{-22} s 的量级，Ω^-粒子的寿命要比它们长 12 个量级，是一个典型的稳定粒子. 实验上寻找 Ω^- 粒子成为 $SU(3)$群对称性理论的判定性的检验.

1964 年 2 月美国布鲁克海文实验室的萨米欧斯(N. Samios)按照盖耳曼预言的衰变模式，终于找到了 Ω^-粒子，Ω^-粒子产生的反应为：

$$K^- + p \to K^+ + K^0 + \Omega^-, \tag{4.6.8}$$

Ω^-粒子产生后，经过一定时间衰变为

$$\Omega^- \to \Xi^0 + \pi^-, \tag{4.6.9}$$

π^-是带电的，Ξ^0 不带电，Ξ^0 经过一段时间后再衰变为

$$\Xi^0 \to \Lambda^0 + \pi^0, \tag{4.6.10}$$

π^0 很快衰变为两个能量很大的光子，Λ^0 不带电，经过一段时间后再衰变为

$$\Lambda^0 \to p + \pi^-. \tag{4.6.11}$$

其产物都是带电粒子，所有带电粒子都可以在气泡室里看到径迹，经过复杂的分析可以把 Ω^-粒子的出现判定性地辨认出来，并确定其质量为 1686 ± 12 MeV. 实验判定 Ω^-粒子的基本性质和理论预言完全符合. 1964 年 Ω^-粒子的发现作为粒子物理的重大突破性进展而载入史册，它标志着 $SU(3)$群对称性理论的确立.

例题 4.6.1 已知 Ξ^-的 $Q=-1, b=1, S=-2$. 人们曾根据这些性质预言存在另一种 Ξ 粒子，试说明为什么一定存在另外一种 Ξ 粒子，指出该种粒子的 Q、b、S、I 和 I_3 等量子数的数值，并对该粒子命名.

解 由盖耳曼-西岛关系得到对 Ξ^-粒子：

$$I_3 = Q - \frac{1}{2}(b+S) = -\frac{1}{2},$$

由同位旋多重态知至少存在一个粒子，其重子数 $b=1$，奇异数 $S=-2$，$I_3=\frac{1}{2}$，由盖耳曼-西岛关系得其电荷为

$$Q=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}(1-2)=0,$$

可以命名为 Ξ^0.

注意：同一同位旋多重态的粒子的重子数 b，奇异数 S 必须相等；因此重子数 b 和奇异数 S 不为零的正反粒子不属于同一同位旋多重态. 只有重子数 b，奇异数 S 等都为零的介子，其正反粒子才属于同一同位旋多重态.

4.6.2 夸克模型

夸克模型

1964 年美国物理学家盖耳曼和兹韦格(George Zweig)相互独立地提出了强子的结构模型. 盖耳曼认为，重子的八重态和十重态都是由三个属于基础表示的元素构成. 这些元素的重子数必须是 1/3，才能组成重子数为 1 的粒子. 电荷必须是 $e/3$ 的整数倍. 他称这三个基础表示为 u,d,s. 盖耳曼将论文投寄到当时新创办不久的《物理通讯》，很快就被发表. 他将基础表示命名为夸克(quark). 它的英文原意为海鸥、苍鹰的鸣叫声，常常出现在德国和荷兰食品店门前的广告上，意思是一种流动的奶酪. 盖耳曼由于对“基本粒子”的分类以及相互作用的研究，获得了 1969 年诺贝尔物理学奖. 夸克模型建立初期认为存在 3 种夸克，理论上认为至少存在 6 种夸克. 夸克按其电荷、相互作用性质以及在相互作用中显现出来的质量分成若干“味”，当时提出的有三味：即“上夸克”、“下夸克”和“奇异夸克”，分别用符号 u,d,s 代表. 1974 年丁肇中(S. C. C. Ting)和里克特(B. Richter)领导的两个实验组分别在美国的布鲁克海文国家实验室(BNL)和斯坦福实验室发现了新粒子，两个组分别命名为 J 和 ψ 粒子，实验和理论都证明这种新粒子是由第四种夸克——粲夸克和反粲夸克构成的. 粲夸克的粲数为 1. 丁肇中和里克特获得了 1976 诺贝尔物理学奖. J/ψ 粒子的质量为 3096 MeV，它以共振态的形式出现，但是它的

寿命却比普通强子共振态长100倍,粲夸克是1970年由格拉肖等人在理论上预言的,J/ψ粒子是第一次从实验上显出粲夸克的存在,从而为夸克模型的真实性提供了有力的证据.正由于粲夸克与普通夸克性质不同,难以转化,因此J/ψ粒子的寿命特别长.1976年莱德曼领导的实验组在美国FNAL发现了由第五种夸克——底夸克和反底夸克组成质量为9.5 GeV的新粒子Υ.底夸克的底量子数为−1.根据对称性,应该有第六种夸克——顶夸克存在,1995年3月,美国的费米实验室才正式宣布发现了顶夸克.顶夸克的顶量子数为1.粲夸克、底夸克和顶夸克分别用c,b和t表示.这样六味夸克全部被发现了.在强相互作用中夸克的味守恒.这6味夸克的性质列于表4.6.1.

表 4.6.1

味	质量	电荷	同位旋	同位旋	奇异数	粲数	底数	顶数
	m	Q	I	I_3	S	C	B	T
上u	330 MeV	2/3	1/2	1/2	0	0	0	0
下d	330 MeV	−1/3	1/2	−1/2	0	0	0	0
奇异s	500 MeV	−1/3	0	0	−1	0	0	0
粲c	1500 MeV	2/3	0	0	0	1	0	0
底b	5000 MeV	−1/3	0	0	0	0	−1	0
顶t	180±12 GeV	2/3	0	0	0	0	0	1

前三味夸克质量轻,统称为轻夸克;后三味夸克质量重,统称为重夸克.如果用原子量来表示顶夸克的质量,顶夸克的"原子量"为193.24,作为对比,铱的原子量为192.22,铱的重子数为192,然而顶夸克的重子数只是1/3.在重子数上的差别就显现出它们分属于物质结构的不同层次.

在色相互作用和电磁相互作用过程中,夸克的味不变,可以有夸克和反夸克的成对产生或湮灭;在弱相互作用过程中,夸克的味可以改变.

夸克内部对称性守恒量完全满足推广的盖耳曼-西岛关系:

$$Q = I_3 + \frac{1}{2}(b + S + C + B + T). \qquad (4.6.12)$$

类似于由元素在元素周期表中的位置可以确定其原子的性质，由夸克模型可以计算粒子的性质，包括质量、磁偶极矩、衰变方式、寿命、反应产物等. 理论计算和实验测量符合得很好. 事实上在夸克模型的基础上已对已知的几百种粒子进行了计算. 夸克模型中最不平常的是夸克具有分数电荷. 所有已经观察到的粒子都只带有整数电荷，虽然自由夸克从来没有被观测到，但是深入到核子内部的散射实验证实存在三个点状目标，其自旋为 1/2，带电分别为 +2/3 和 −1/3. 这些实验给出了核子中存在夸克的直接证据. 根据强子的基本性质，规定夸克具有下列特点：(1) 夸克是自旋为 1/2 的费米子；(2) 夸克的重子数为 1/3；(3) 每个夸克都有相应的反夸克.

例题 4.6.2 分析下列过程中的夸克变化：

(1) $p \to n + e^+ + \nu_e$；

(2) $\Omega^- \to \Lambda^0 + K^-$；

(3) $K^- + p \to \Omega^- + K^+ + K^0$.

解

(1) $p \to n + e^+ + \nu_e$；

$$uud \to udd + e^+ + \nu_e.$$

去掉共同的部分得：

$$u \to d + e^+ + \nu_e,$$

一个 u 夸克通过 β 衰变变成了一个 d 夸克.

(2) $\Omega^- \to \Lambda^0 + K^-$；

$$sss \to uds + s\bar{u},$$

$$s \to u + d + \bar{u}.$$

一个 s 夸克转变为一个 d 夸克，一对 $u\bar{u}$ 夸克从衰变能产生.

(3) $K^- + p \to \Omega^- + K^+ + K^0$，

$$s\bar{u} + uud \to sss + u\bar{s} + d\bar{s},$$

$$\bar{u} + u \to ss + \bar{s} + \bar{s}.$$

一对 $u\bar{u}$ 夸克湮灭，两对 $s\bar{s}$ 夸克从反应能产生.

色荷和色相互作用

夸克和反夸克结合成强子是通过色相互作用实现的，媒介子为胶子. 夸克和反夸克通过交换胶子结合成强子. 夸克和反夸克可以放

出或吸收胶子的能力来源于它们具有色荷.夸克可以具有的色荷有3种.每种味的夸克按其在强相互作用中的地位区分为3种,称为"红"、"蓝"、"绿"三"色".即每味夸克和反夸克又都分别各有3色.它们满足色 $SU(3)$ 对称性.重子中的三个夸克必定具有不同的颜色,三种颜色混合成无色.介子中的夸克和反夸克的颜色互补,因此实际上观测到的强子是"无色"的.夸克放出和吸收胶子时其所带色荷可以改变,也可以不改变.带电粒子之间的电磁相互作用是通过交换光子来实现的.类似地夸克之间的相互作用是通过交换胶子来实现的.带电粒子所带电荷的多少决定它参与相互作用的强弱,相应地夸克所参与的强相互作用的行为和强弱是由夸克所带色荷的大小来决定的.电荷只有一种,决定了光子只有一种;夸克的色荷有3种,胶子是一个双色体,由双色态可以组成8种带色的胶子.光子本身不带电荷,所以光子本身不能直接放出和吸收光子.胶子本身也带色荷,所以胶子本身就能直接放出和吸收胶子.1979年丁肇中小组证实传递强相互作用的媒介子——胶子的存在,并测定了它的自旋.

色禁闭

尽管强子是由夸克和胶子组成的,但是至今为止,实验上从没有直接观测到自由的独立存在的夸克或胶子.这是因为色相互作用具有"禁闭"的性质.即带色的粒子之间的色相互作用并不随距离增加而迅速减弱,从而使粒子最终互相独立而处于自由状态.只有由夸克和胶子组成的无色系统才可以自由地单独存在,带色的夸克和胶子只能存在于这个系统的内部.色相互作用的这种禁闭性质最先是根据实验结果的启发而提出的理论假设,但是至今在理论上没有最后的严格证明.尽管如此,色禁闭仍然是被普遍接受的基本假定.虽然夸克和胶子被禁闭在强子的内部,但是在高能的物理过程中,被禁闭的这些夸克和胶子在强子内部又近似地可以看作无相互作用.色相互作用的这个性质称为"渐进自由".

4.6.3 重子和介子的夸克构成

重子的夸克组成

从最低级近似看,重子是由3个夸克组成的.这些夸克可以是同

一味的，也可以是不同味的．下面我们讨论由三味轻夸克组成的重子．由 $SU(3)$ 理论知道，三种夸克可以构成重子的单态、八重态和十重态．三个自旋为 1/2 的粒子可以组合成总自旋为 1/2 或 3/2、宇称为 $(-1)^L$ 的粒子，L 是它们相对运动轨道角动量量子数．对于 $L=0$ 的情况，总角动量量子数 J 可以是 $J=1/2$ 或 3/2．规定夸克的宇称都是 $+1$．所以存在 $J^P=\frac{1}{2}^+$ 的稳定重子及 $J^P=\frac{3}{2}^+$ 的低激发态重子．$J^P=\frac{1}{2}^+$ 的重子包括 n，p，Σ^-，Σ^0，Λ^0，Σ^+，Ξ^-，Ξ^0，组成八重态；$J^P=\frac{3}{2}^+$ 重子包括有 Δ^{++}，Δ^+，Δ^0，Δ^-，Σ^{+*}，Σ^{0*}，Σ^{-*}，Ξ^{0*}，Ξ^{-*}，Ω^-，组成十重态．当三个夸克之间的相对运动角动量 $L\neq 0$ 时，它们组成各种高激发态．组成的重子波函数对每对夸克的交换应该是反对称的，夸克存在四种空间：坐标空间 $(\boldsymbol{r},t)$，自旋空间 (S)，味空间 $(f$：u，d，s，c，b，t$)$ 和颜色空间 $(C$：R，G，B$)$．重子波函数应该是四空间波函数的乘积．表 4.6.2 给出一些重子的夸克组成．

表 4.6.2

Y	I	夸克组成	$J^P=\frac{1}{2}$ 八重态	$J^P=\frac{3}{2}$ 十重态	质量 /MeV
1	1/2	ddu，uud	n，p		939
0	1	$\frac{s(du-ud)}{\sqrt{2}}$	Λ		1116
0	1	sdd，$\frac{s(du+ud)}{\sqrt{2}}$，suu	Σ^-，Σ^0，Σ^+		1189
-1	1/2	ssd，ssu	Ξ^-，Ξ^0		1315
1	3/2	ddd，ddu，duu，uuu		Δ^-，Δ^0，Δ^+，Δ^{++}	1232
0	1	sdd，sdu，suu		Σ^{-*}，Σ^{0*}，Σ^{+*}	1385
-1	1/2	ssd，ssu		Ξ^{-*}，Ξ^{0*}	1530
-2	0	sss		Ω^-	1672

介子的夸克组成

夸克模型认为，介子是由一个夸克 q 和一个反夸克 $\bar{q}'$ 组成的束缚态，q 和 $\bar{q}'$ 的味可以是不同的．如果 $q\bar{q}'$ 态的轨道角动量是 L，则状

态的宇称 $P'=(-1)^{L+1}$. 表 4.6.3 介绍一些介子的夸克组成，括号中的数值表示以 MeV 为单位的粒子的质量.

表 4.6.3

Y	I	夸克组成	$J^P=0^-$	$J^P=1^-$	
0	1	$\bar{u}d,\frac{u\bar{u}-\bar{d}d}{\sqrt{2}},\bar{d}u$	π^-,π^0,π^+	ρ^-,ρ^0,ρ^+	八重态
0	$\frac{1}{2}$	$\bar{s}d,\bar{s}u$	K^0,K^+	K^{*0},K^{*+}	
-1	$\frac{1}{2}$	$\bar{u}s,\bar{d}s$	$K^-,\bar{K}^0$	$K^{*-},\bar{K}^{*0}$	
0	0	$\frac{\bar{u}u+\bar{d}d+2s\bar{s}}{\sqrt{6}}$	$\eta(549)$		
0	0	$\frac{\bar{u}u+d\bar{d}}{\sqrt{2}}$		$\omega(783)$	
0	0	$\frac{\bar{u}u+\bar{d}d+s\bar{s}}{\sqrt{3}}$	$\eta'(958)$		单态
0	0	$\bar{s}s$		$\varphi(1020)$	

由一个夸克和它本身的反夸克组成的 $q\bar{q}$ 态，也是电荷共轭的本征态，$C'=(-1)^{L+S}$，其中自旋 $S=0$ 或 1. 对 $L=0$ 的情况，两个自旋为 1/2 的粒子可以组成 $^1S_0$ 或 $^3S_1$ 两种状态. 因而 $L=0$ 的 $q\bar{q}$ 可以构成膺标量介子 $J^P=0^-$ 及矢量介子 $J^P=1^-$ 两种状态. qq' 的轨道角动量 $L\neq0$ 的状态构成各种介子的激发态.

价夸克和海夸克

组成介子和重子的夸克和反夸克通过交换胶子相互作用. 在强子内部，总是不断地有胶子被放出和吸收，并处于统计平衡的状态. 因此，在强子内部除了有上面所说的夸克和反夸克外，还存在数目未知然而是确定的胶子. 胶子可以转化为夸克和反夸克对. 而夸克和反夸克对又可以湮灭为胶子，因此在强子内部还存在数目未知然而是确定的夸克和反夸克对. 这样存在的每一个夸克和反夸克对在强子内部并不要求结合成一个小集团，但总起来说这种夸克的数目和相应的反夸克的数目相等. 为了区分组成强子的夸克和由胶子转化的

夸克，前者称为价夸克，后者称为海夸克. 价夸克是强子中少数的味和数目完全确定的夸克，它们决定了粒子的性质. 每个强子内部所有的价夸克的色性质是保证其整体对外来说是无色的，但是其味性质则不一定是无味的. 海夸克是强子中数目不定的夸克和反夸克. 任何时刻其总和为"无色无味"的. 海夸克的数目稳定是统计平衡的结果.

胶球和四夸克态

胶子也能起到价粒子的作用，称为价"胶子". 胶球就是由两个、三个或多个价胶子所组成的. 四夸克态是由两个价夸克和两个价反夸克组成的强子. 混杂子是由一对价夸克和价反夸克以及一个价胶子组成的强子.

习　题

4.6.1　已知自旋宇称 J^P 为 $\frac{3}{2}^+$ 的 Δ^- 的 $Q=-1, b=1, S=0, I=3/2$. 根据这些性质描述属于同一同位旋多重态的其他 Δ 粒子的 Q、b、S、I 和 I_3 等量子数的数值，并对这些 Δ 粒子命名. 这些粒子都是属于自旋宇称为 $\frac{3}{2}^+$ 的重子十重态的，给出此十重态中其他六个粒子的 Q、b、S、I 和 I_3 等量子数的数值.

4.6.2　在夸克模型中，强子的量子数是由组成的夸克决定的，请写出下列强子的电荷 Q、同位旋 I 及 I_3、奇异数 S 和重子数 b.

$$\overline{\mathrm{K}}(\mathrm{s\bar{d}}),\ \phi(\mathrm{s\bar{s}}),\ \Delta(\mathrm{uuu}),\ \Xi(\mathrm{ssd}),\ \overline{\Omega}(\mathrm{\bar{s}\,\bar{s}\,\bar{s}})$$

4.6.3　某一 D 介子由一个 c 夸克和一个 $\bar{\mathrm{u}}$ 夸克组成，试求它的自旋、电荷、重子数、奇异数和粲数.

4.6.4　试将下列衰变分析成组分夸克的过程：

(1) $\overline{\Omega}\to\Lambda^0+\mathrm{K}^-$

(2) $\mathrm{n}\to\mathrm{p}+\mathrm{e}^-+\bar{\nu}_e$

(3) $\pi^0\to\gamma+\gamma$

(4) $\mathrm{K}^0\to\pi^++\pi^-$

(5) $\Delta^{*++}\to\mathrm{p}+\pi^+$

(6) $\Sigma^-\to\mathrm{n}+\pi^-$

4.6.5　Δ^-粒子是由 3 个 d 夸克组成的，试由此推导 d 夸克的 J、Q、b、S、I 和 I_3 量子数；和 d 夸克属于同一代的其他费米子还有哪些粒子？给出它们的 J、Q、b、S、I 和 I_3 量子数.

4.7 相互作用的统一和标准模型

4.7.1 杨振宁-米尔斯规范场

电磁相互作用的统一

电学和磁学本来是两个独立的学科，在法拉第和奥斯特发现运动的电荷能产生磁场和变化的磁场能产生电场后，它们形成了一个统一的学科. 麦克斯韦发展了电磁场理论，并预言了电磁波的存在. 进一步的研究确认电磁场的能量是量子化的，光子是电磁场能量的量子，也是电磁相互作用的媒介粒子. 受电磁统一理论的启发，法拉第和爱因斯坦都曾研究引力与电磁力的统一，但是都没有成功.

局域规范不变性

在电磁学中，电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 可以由电磁势$(\phi,\boldsymbol{A})$导出：

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{E} &= -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}, \\ \boldsymbol{B} &= \nabla\times\boldsymbol{A}, \end{aligned}\right\} \tag{4.7.1}$$

$(\boldsymbol{E},\boldsymbol{B})$与$(\phi,\boldsymbol{A})$之间不是一一对应的关系，给定的$(\boldsymbol{E},\boldsymbol{B})$可以由许多组不同的$(\phi,\boldsymbol{A})$导出. 如：

$$\left.\begin{aligned} \phi' &= \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \chi}{\partial t}, \\ \boldsymbol{A}' &= \boldsymbol{A} + \nabla\chi, \end{aligned}\right\} \tag{4.7.2}$$

这里 χ 为时间和空间坐标的任意函数. 很容易验证$(\phi',\boldsymbol{A}')$所给出的$(\boldsymbol{E},\boldsymbol{B})$与$(\phi,\boldsymbol{A})$所给出的相同. 变换(4.7.2)称为规范变换.

在量子力学中，粒子在电磁场中的薛定谔方程为

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\phi\right]\psi = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{4.7.3}$$

在规范变换(4.7.2)下也是不变的. 但需波函数 ψ 的变换规律为：

$$\psi \rightarrow \psi' = \exp\left(\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\chi\right)\psi. \tag{4.7.4}$$

这是波函数相位的变换. 因为函数 χ 是时空的函数,不同时空点的变换不同,因此规范变换(4.7.2)和(4.7.4)是局域的. 从自由粒子的薛定谔方程出发,为了保证规范不变性,只有通过置换:

$$\boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}, \quad p_0 \to p_0 - \frac{e}{c}\phi, \tag{4.7.5}$$

才能得到正确的与电磁场相互作用的粒子的运动方程. 其中

$$p_0 = \frac{\mathrm{i}\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \tag{4.7.6}$$

所得的粒子在电磁场中运动的方程就是方程(4.7.3). 1929 年韦尔(H. Weyl)指出,电磁理论的规范不变性是与电荷守恒相联系的. 规范势(ϕ,$\boldsymbol{A}$)的引入确定了光子的自旋为 1,规范场量子必须是无静止质量的. 如果引入规范场量子的静止质量,规范对称性将被破坏.

杨振宁-米尔斯规范场

质子与中子电磁性质不同,但是它们之间的核相互作用完全一样. 它们与 π 介子(π^+,π^0,π^-)间的相互作用很强,力程很短. 质子与中子被认为是同位旋的二重态,π^+,π^0,π^-是同位旋的三重态. 核子之间的强相互作用的对称性的重要体现为同位旋守恒. 杨振宁考虑到电动力学的规范不变性和电荷守恒有关,推想到核力的同位旋守恒是否意味着强相互作用也能用规范不变性理论描述呢? 杨振宁和米尔斯假定核子间的媒介场必须提供中性和带正负电荷的三种量子,即 B^i_μ,$i=1,2,3$,简写为 $\boldsymbol{B}_\mu$. 场和粒子的耦合规律与电磁场类似,从自由粒子到与场相互作用粒子的运动方程需作以下置换:

$$p_\mu \to p_\mu - g\,\frac{\boldsymbol{\tau}}{2}\cdot\boldsymbol{B}_\mu, \tag{4.7.7}$$

其中 g 为耦合常数. τ 为泡利矩阵:

$$\tau_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{4.7.8}$$

杨振宁遇到的最大困难是规范场强和规范势的关系. 如果按照电磁场的关系简单推广,则规范不变性无法保证. 另一个问题是规范场量子的质量必须为零与强弱相互作用都是短程的性质相矛盾. 1954 年

在一次报告会上，泡利问杨振宁："你的 B 场量子质量是多少？"这个问题直到 1967 年才在弱电相互作用统一中极为巧妙地解决了.

4.7.2 电弱统一理论

Higgs 机制

在理论中明显地引入场量子的质量项会破坏规范不变性，引入质量项导致的对称性破缺称为"明显破缺". 还有一种破缺办法不改动描述场的哈密顿量，因此理论仍然是规范不变的. 对称之所以破缺是场的最低能量态不再满足对称性，这称为对称的"自发破缺". 在数学上，一个方程的解不一定具有方程本身的全部对称性. 在物理上，一个简单例子是铁磁的有序-无序相变：在温度高于居里温度时，铁磁体的分子磁矩是无规的，总磁矩为零，磁矩取向是各向同性的，满足旋转对称性. 在居里温度以下，分子磁矩在磁畴范围内取某一方向有序排列. 希格斯(P. W. Higgs)提出虽然体系的哈密顿量是各向同性的，但是体系的基态不满足哈密顿量的旋转对称性，而在空间选择了某一特定的方向. 对规范场的对称性自发破缺，其后果就使规范场量子获得了质量，尽管体系的哈密顿量中并不包含质量项. 由于哈密顿量中不含质量项，因而理论仍然是规范不变的. 这种使规范场量子获得质量的机制称为 Higgs 机制. Higgs 机制要求至少要有一种 Higgs 粒子.

电弱统一模型

人们在对物质结构的了解深入到夸克-轻子层次的同时，对粒子间的相互作用也有了进一步的了解. 1961 年美国的格拉肖(S. L. Glashow)首先提出了一个 $SU(2)\times U(1)$电弱统一模型，1967 年美国的温伯格(S. Weinberg)以及 1968 年巴基斯坦的萨拉姆(A. Salam)独立地把这一模型表述成规范不变性的理论. 认为电磁相互作用和弱相互作用实际上是一种相互作用，称为电弱相互作用. 传递电弱相互作用的场量子有四种，它们都是零质量的粒子.

按照电弱统一理论，自然界存在 Higgs 场，它的自相互作用的特殊性质实现了电弱相互作用对称性的自发破缺，从而使电弱相互作用在能量低于 250 GeV 的范围内分解为性质和强度截然不同的电

磁相互作用和弱相互作用;使弱相互作用的媒介粒子获得了很大的静止质量;使带电轻子和夸克获得了静止质量. Higgs 场的激发态就表现为 Higgs 粒子,Higgs 场的存在决定了 Higgs 粒子的存在. Higgs 粒子与其他各种粒子之间的相互作用性质是全部清楚的.

但是引入 Higgs 机制后,由于对称性的自发破缺,只有一种媒介粒子即光子保持了零质量,其他三种获得了巨大的质量,成为弱相互作用的媒介粒子 $W^{\pm}$和 Z^0. 在他们的理论中预言了:(1) 存在 $W^{\pm}$和 Z^0 粒子,它们的质量约为 81 GeV;(2) 弱相互作用中存在电荷中性流,即不改变粒子电荷状态的弱相互作用过程;(3) 中性弱流不改变夸克的味量子数,为了解释禁戒过程 $K_L^0 \rightarrow \mu^+\mu^-$,1970 年格拉肖提出了存在粲夸克的理论;(4)对称性破缺的机制是通过 Higgs 机制,所以应该存在 Higgs 粒子. 1973 年在实验室发现了弱中性流的反应,1974 年实验确认了第四种夸克——粲夸克的存在,一系列的实验都与这个理论的预言相符,电弱统一理论取得了极大的成功. 格拉肖、温伯格和萨拉姆因此获 1979 年诺贝尔物理学奖.

电弱统一理论提出,如同在电磁相互作用中光子是电磁力的载体一样,应该存在重粒子携带弱力,这些新粒子的质量约为 81 GeV. 1983 年在欧洲核子中心卡罗 · 鲁比亚(Carlo Rubbia)领导的研究组发现了这些电弱统一理论预言的玻色子 $W^{\pm}$和 Z^0,他们将质子和反质子的束流加速到 270 GeV,对撞能量为 540 GeV,已经超出产生中间玻色子阈能的 5 倍. 为此他们获得了 1984 年诺贝尔物理学奖. 这些粒子的发现给电弱统一理论提供了直接的实验证明.

对电弱统一理论的检验剩下的疑问是 Higgs 粒子真的存在吗? 实验至今还没有发现 Higgs 粒子存在的证据.

4.7.3 标准模型中的相互作用

描述基本粒子如何组织和他们之间如何相互作用的理论图象称为粒子物理的标准模型. 标准模型认为,微观物质的基本规范相互作用有 3 种: 色相互作用、电弱相互作用和引力相互作用. 在能量低于 250 GeV 的范围内,电弱相互作用表现为电磁相互作用和弱相互作

用. 此外还存在 1 种非规范的相互作用——Higgs 粒子相互作用. 这 4 种相互作用的基本性质如下：(1) 色相互作用是一种规范，满足很高的 $SU(3)$规范对称性，它在实验上表现为粒子间的强相互作用. 色相互作用的媒介粒子是胶子 g，色相互作用的 $SU(3)$规范对称性决定了存在 8 种不同的胶子，它们没有静止质量. 色相互作用是一种短程相互作用，作用力程为 10^{-15} m，色耦合常数 α_s 有普适性，即各种不同的夸克的色耦合常数相同. (2) 电弱相互作用也是规范相互作用，具有比较高的对称性，电弱相互作用的媒介粒子有 4 种，原来都没有质量. 但是在能量低于 250 GeV 的范围，这种对称性自发地破缺了，统一的电弱相互作用分解成为性质极不相同的电磁相互作用和弱相互作用. 在 10^{-15} m 这个粒子物理的典型尺度，两个带单位电荷粒子之间的电磁相互作用的强度比弱相互作用的强度约大 10^8 倍. 这样巨大的差别来源于媒介粒子质量的巨大差异. 电磁相互作用的媒介粒子是光子，仍然没有静止质量，电磁相互作用是一种长程相互作用. 耦合常数即精细结构常数 α 有普适性. 然而弱相互作用的三种媒介粒子 $W^{\pm}$，Z^0 都获得了很大的静止质量，约为质子静止质量的 85～97 倍. 弱相互作用是一种短程相互作用，作用力程约为 10^{-18} m. 弱相互作用的耦合常数有普适性，与 $W^{\pm}$的耦合常数为 g_2，与 Z^0 的耦合常数普适为 $g_2/\cos\theta_W$. (3) 引力相互作用普遍存在于所有物质粒子之间，它的媒介粒子称为引力子，也没有静止质量. 耦合常数中去掉正比于能量的因子后剩下的是一个普适常数. 电磁相互作用和引力相互作用都是长程相互作用，但是它们的强度差别极大，两个静止的质子之间的库仑斥力是它们之间万有引力的 1.237×10^{36}倍. (4) Higgs 粒子相互作用媒介粒子为 Higgs 粒子，它是一种比弱相互作用的力程还要短的短程相互作用. 耦合常数正比于粒子的静止质量，去掉正比于质量的因子后，剩下的是一个普适常数. 两个电子相距小于 10^{-18} m 时，它们之间的 Higgs 粒子相互作用相当于电磁相互作用的4.7×10^{-11}倍.

4.7.4 标准模型中粒子的分类

在标准模型中，粒子可分为 3 大类.

规范玻色子

4 种基本相互作用的媒介粒子共 13 种. 8 种胶子、光子和 $W^{\pm}$ 粒子、Z^0 粒子等 12 种自旋量子数为 1 的规范玻色子已经被实验证实，但至今还没有自旋量子数为 2 的引力子存在的直接实验证据.

费米子

自旋量子数为 1/2 的轻子和夸克都是费米子. 目前它们都被认为是点粒子. 它们是物质的基本构成"砖块". 按照电弱统一模型，自然界的费米子必须是成组地存在. 每一组费米子的电荷之和等于零. 一组费米子称为"一代"费米子，每代有 8 个费米子，其中包括一个中微子、一个带电轻子和两味夸克，其中一个夸克带 2/3 单位电荷，一个夸克带 −1/3 单位电荷. 轻子不带色荷，不直接参与色相互作用. 夸克带色荷，每味夸克有 3 种色荷状态，直接参与色相互作用.

现在已知自然界至少存在 3 代费米子，3 代共 24 种费米子，加上它们的反粒子共有 48 种费米子，这 48 种费米子全部为实验证实. 第一代的夸克和轻子组成了我们日常生活所熟悉的物质世界，第二代和第三代夸克和轻子组成了在高能条件下出现的物质状态，每一代都重复着前一代的主要物理性质，"代"之间的重复性，似乎反映了夸克和轻子之间的内在联系，它们是否也存在内部结构？夸克和轻子是否还有更多的"代"？这些需要进一步探索. 表 4.7.1 列出了 3 代共 48 种费米子的基本性质.

表 4.7.1　标准模型中的费米子

粒子类型	轻　子		夸　克	
电　荷	0	−1	2/3	−1/3
重子数	0	0	1/3	1/3
色状态数	1	1	3	3
第一代	中微子 ν_e	电子 e	上夸克 u	下夸克 d
第二代	中微子 ν_μ	μ 子	粲夸克 c	奇异夸克 s
第三代	中微子 ν_τ	τ 子	顶夸克 t	底夸克 b

按照标准模型，物质世界由上述 62 种粒子组成. 除引力子和

Higgs 粒子外，其余粒子的存在都已被实验证实. 引力子由于作用太弱，不可能在精确的高能物理实验中进行直接观测. Higgs 粒子是惟一应该能找到但还未找到的粒子. 1990 年在新加坡召开的第 25 届国际高能物理会议上对标准模型的评价为："标准模型理论令人注目地成功经受了所有实验的检验，超出标准模型理论的实验结果一个也没有找到."

在新世纪开始之时，很多人认为标准模型不可能是物质基本结构的最终认识. 突破标准模型的迹象不断被提出. 如果存在中微子振荡，这将是超出粒子物理标准模型的第一个信号. 占宇宙 90%的暗物质也难以全部是标准模型中的粒子. 大统一理论的发展，要求有更多的粒子.

4.7.5 大统一理论和超弦

大统一理论

自 70 年代以来，量子色动力学理论由于引进了夸克和规范场论，在解释粒子强相互作用种种现象上，获得了巨大的成功. 1967～1968 年间提出的弱电统一理论，由于引进了夸克，再加上带有真空破缺机制的规范场论，也获得了巨大的成功. 人们能否在夸克的基础上，对带有破缺机制的规范场论进一步加以扩展，从而实现强、弱、电的更大的统一？这就是大统一理论的基本思想. 当时有一些研究结果鼓舞大统一理论的研究：(1) 发现在能量为 10^{15} GeV 尺度时，强、弱、电三种相互作用耦合常数相交于一点. (2) 由 $SU(5)$ 对称的大统一理论出发，可算出决定 Z^0 和 $W^{\pm}$ 粒子质量比值的一个参量 $\sin^2\theta_W$，并和实验相当符合. (3) 大统一理论能预言质子的寿命为 10^{30}年，能预言宇宙间必定存在着数量可观的磁单极子，以及一大批暂时还难看到的寿命极短、质量极重的许多粒子. (4)大统一理论似乎能解释宇宙间粒子数和光子数之间的比值.

可惜，进一步研究表明质子寿命的测量值并不是 10^{30}年，而是至少大于 10^{32}年！大统一理论所预言必然存在的磁单极子，虽然屡经高灵敏度实验装置的探索，但没有找到！根据已测得的精度更高的强、

弱、电相互作用耦合常数的实验数据，重新计算发现这三种耦合常数在能量尺度为 10^{15} GeV 时，并不相交在一点，而是在 8 倍标准偏差之外，分别相交在三点！这就在根本上动摇了大统一理论！与此同时，$\sin^2\theta_W$ 的数值也和最新、最高精度的实验值不符，相差更大，达到 10 倍标准偏差以外.

为了克服大统一理论的困难，人们引进了“超对称”理论①②. “超对称”认为玻色子和费米子之间有某种破缺了的对称性，因而现在已经观测到的粒子，均有它的超对称的伴侣，并具有 $R=1$ 的量子数，而现有的已知粒子，都只具有 $R=0$ 的量子数. 于是，现有的粒子物理的家族，立刻增加了一倍. 这些新增加的粒子家族，大都具有极重的质量，较短的寿命，以至于在目前的超高能对撞机上无法观测这些粒子. 引进这些新添加的超对称粒子后，立即产生两个后果：(1)上述的三个耦合常数将在 10^{16} GeV 的范围内重新交于一点，质子寿命得以延长到 10^{34}年以上. (2) 由这一超对称的大统一理论又能精确地算出 $\sin^2\theta_W$ 的数值，这和目前高精度的实验值相当符合. 强、弱、电三种相互作用的统一，又是可能的了. 迄今为止，实验上还没有找到任何一个“超对称”粒子，为了保持理论上的自洽性，这一新的“超对称”的“大统一”理论前通常加上“最小”的形容词. 在“超对称”理论中，不可避免地要引进大量的不稳定的，质量极重的超对称粒子. 但是，在引进的所有的超对称粒子中，必有一个相对最轻的、中性的，并且是稳定的粒子的存在. 因为这些超对称粒子必然带有 $R=1$ 的量子数，使得这些超对称粒子不能转化为通常人们所熟知的夸克、轻子和中间玻色子等粒子，因而必将在宇宙空间中稳定地存在，这就成为冷暗物质的最佳的候选者.

超弦

把量子力学和广义相对论相结合的理论称为量子引力理论. 由于引力常量具有 -1 的质量量纲，因此量子引力是不可重正化的. 这就是说量子引力理论中将出现不可消除的发散行为，从而使得所建

---

① 何作庥，庆承瑞，物理，**24** (1995) 1.

② 吴岳良，高能物理与核物理，**23** (1999) 151.

立的量子引力是不自洽的. 70 年代中期以来,人们对量子引力的研究曾在超引力和超弦两个方向进行探索. 超引力是超对称引力理论的简称. 1971 年 P. 雷蒙德等人①在量子场论中提出一种新的对称性,它是联系费米子和玻色子之间的对称性,称为超对称性. 在超引力中,引力是通过超对称定域化而产生的,由于超引力最终仍是不可重正化的,且不能导出粒子的手征性,这样在 80 年代中期后,对超引力的研究就衰落下去. 继超引力之后,在探索量子引力的途径中,1981 年 M. 格林和 J. 许瓦兹提出了超弦模型,它是把超对称性和弦相结合的理论.

超弦理论②认为构成我们物质世界最基本的组元不是点粒子,而是具有超对称性的一维物质线段即弦. 这种超对称性的弦称为超弦. 弦的特征长度是普朗克长度,约为 10^{-33}厘米. 粒子被看作弦振动的激发,弦的每种振动模式对应于一种粒子. 值得指出,10 维超弦理论不仅避免了广义相对论和量子力学相结合时遇到的重正化困难,而且还把弱、电、强和引力四种作用看成是一种基本作用的不同的侧面.

1995～1996 年期间,人们研究了超弦理论的对偶性问题,认识到此前五种超弦理论起源于某个 11 维理论的第 11 维卷曲,这个理论称为 M 理论. M 理论的时空是 11 维的,其中时间是 1 维的,空间是 10 维的. 由于现实空间是 3 维的,多余的 7 维空间称为额外空间,而额外空间就必须紧致化,紧致化后 7 维空间其线度大小是普朗克长度,所以人们观测不到. 剩下的 4 维时空,正是我们的现实世界具有的. M 理论推广了超弦的基本思想,认为构成我们世界的基本组元是块 (brane 或 nugget). 所谓块是指既包含 1 维的弦,又包含 2 维的膜,更包含 3 维的体,还含有高于 3 维的物质实体. 块是具有超对称性的,所以把它们称为超块.

---

① P. Freund, Introduction to Supersymmetry [M], Cambridge University Press, 1986.

② M. Kaku, Introduction to Superstrings [M], Springer Verlag, 1988; M. B. Green, J. H. Schwarz & E. Witten, Superstring theory [M], Cambridge University Press, 1999.

例题4.7.1 假定质子的半衰期为大统一理论预言的10^{33} a.(1)平均多长时间我们能在1 L水中观测到一次质子衰变?(2)如果在一天中能观测到一次质子衰变,需要多少体积的水?

解 (1) 1升水中包含的水分子数为

$$\frac{1000\ \text{g} \times 6.02 \times 10^{23}}{18\ \text{g}} = 3.3 \times 10^{25},$$

每个水分子中含有10个质子,因此1 L水中的质子数为3.3×10^{26}.

衰变率为

$$-\frac{dN}{dt} = \lambda N = \frac{\ln 2}{\tau_{1/2}} N = \frac{0.693}{10^{33}\ \text{a}} \times 3.3 \times 10^{26}$$

$$= 2.3 \times 10^{-7}\ \text{a}^{-1} = \frac{1}{4300000\ \text{a}}.$$

(2) 若$-\frac{dN}{dt} = 1\text{d}^{-1}$,则

$N = -\frac{1}{\lambda}\frac{dN}{dt} = 5.3\times10^{35}$个质子,或$5.3\times10^{34}$个水分子,为$1.6\times10^{9}$ L水.

例题4.7.2 传递弱相互作用的粒子是W和Z^0粒子,它们的质量分别为80 GeV和91 GeV,(1)它们各是多少个质子的质量?(2)试由此估计弱相互作用的力程.

解

(1) $\frac{m_W}{m_p} = 85.3$, $\frac{m_Z}{m_p} = 97.0$;

(2) $\lambdabar = \frac{\hbar}{m_W c} = \frac{\hbar c}{m_W c^2} = 2.46\times10^{-18}$ m.

4.8 粒子和宇宙

4.8.1 哈勃定律

哈勃定律

第一个现代宇宙学模型是爱因斯坦1916年提出的有限而无边的静态宇宙.爱因斯坦的静态宇宙是不稳定的,宇宙一旦经受一个即

使非常微小的收缩，从而引力增强，便将一直收缩下去. 反之，一旦有一个微小的膨胀，便将一直膨胀下去. 1922 年弗里德曼(A. Friedmann)假设宇宙在膨胀，星系与星系之间的距离在不断增大，相互分离的速度也随着增大，应当观测到越远的星系离我们而去的退行速度越大. 1927 年已发现星系谱线普遍有红移，如果是多普勒效应，就意味着星系普遍离银河系而退行. 勒梅特利(G. Lemaitre)进一步指出，这种现象可能是宇宙膨胀的表现. 这些预言正好由在1929 年被发现的哈勃(E. Hubble)定律所证实.

根据广义相对论，质量越大的天体附近，引力场越强，引力场越强的区域，时间的标尺越长，也就是说那里的时钟变慢. 从这样的天体发出的光，频率较慢而相应的标尺较长. 这种由强引力场引起的红移称为引力红移. 在质量较大的天狼星伴星 B，观测到了这种引力红移. 观测结果与理论计算值是相符的. 根据宇宙膨胀学说，远离我们而去的星系也会产生红移，由于星系物质平均密度极低，遥远星系谱线的红移不可能是引力红移，只能是相对运动引起的多普勒红移. 通常定义红移的红移量为谱线波长的相对变化：

$$z = \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0}. \tag{4.8.1}$$

1929 年哈勃(E. Hubble)在分析总结了大量天文观测资料后提出我们观测到的星系的红移与星系离地球的距离 d 成正比：

$$z = \frac{H_0 d}{c}, \tag{4.8.2}$$

这就是哈勃定律. 其中 H_0 为哈勃常数. 下标 0 指的是当前的值，因为这个"常数"实际上是时间的函数. 由于判定星系距离有许多不确定之处，H_0 只能近似地给出. 哈勃当初的测定值为 550 km/(s · Mpc). 1 Mpc$=3.084\times10^{19}$ km. 哈勃常数值在不断修正：

$$H_0 = 100 h_0\ \mathrm{km\cdot s^{-1}\cdot Mpc^{-1}}, \tag{4.8.3}$$

估计 h_0 的范围为 $0.4<h_0<1$. 1995 年哈勃空间望远镜初步定出的哈勃常数为 $H_0=80\pm17$ km/(s · Mpc). 根据相对论多普勒效应，

$$1 + z = \frac{\lambda}{\lambda_0} = \sqrt{\frac{1+v/c}{1-v/c}}, \tag{4.8.4}$$

由此可得运动速度 v 和光速 c 的比值为

$$\frac{v}{c}=\frac{z(2+z)}{2+2z+z^2}. \tag{4.8.5}$$

当红移很小时，近似地有：

$$\frac{v}{c}\approx z,\quad 当\ z\ll 1, \tag{4.8.6}$$

这时哈勃定律可以近似地写成

$$v=H_0 d. \tag{4.8.7}$$

哈勃时间和哈勃半径

根据宇宙膨胀学说，R 表示宇宙中的最大尺度，有时也叫宇宙半径. 如果膨胀不减速，今天的膨胀速率 $\dot{R}_0$ 和过去任何时刻的膨胀速率一样，今天的尺度 $R_0\equiv R(t_0)$ 将在

$$\tau_0\equiv\frac{R_0}{\dot{R}_0}=\frac{1}{H_0} \tag{4.8.8}$$

时间以前收缩为零. 实际的膨胀是在减速的，就是说，过去的膨胀速率更大，R_0 应在比 τ_0 更短的时间内收缩为零. 因此，τ_0 应是现在宇宙实际年龄 t_0 的上限. 根据哈勃常数的观测值，可得

$$1.0\times 10^{10}\ 年<\tau_0<2.5\times 10^{10}\ 年, \tag{4.8.9}$$

这个时间也称为哈勃时间. 进一步的考虑宇宙的年龄由下式给出：

$$t_0=\frac{1}{H_0}\int_0^1\frac{\mathrm{d}x}{\left(1-\Omega_0+\Omega_0\frac{1}{x}\right)^{1/2}}, \tag{4.8.10}$$

其中

$$\Omega_0=\frac{\rho_0}{\rho_c} \tag{4.8.11}$$

为宇宙的密度参数，其值范围为

$$0.1<\Omega_0<2. \tag{4.8.12}$$

$$\rho_c=\frac{3H_0^2}{8\pi G}=1.053\,94(13)\times 10h_0^2\,\mathrm{GeV\cdot m^{-3}} \tag{4.8.13}$$

为宇宙的临界密度，ρ_0 为宇宙的平均密度. 现有的观测值估计：

$$t_0=(15\pm 5)\times 10^9\,\mathrm{a}, \tag{4.8.14}$$

光在哈勃时间内传播的距离为哈勃半径：

$$R_{\mathrm{H}}=\frac{c}{H_0}\sim 2\times 10^{23}\,\mathrm{km}, \tag{4.8.15}$$

这就是我们观测到的宇宙半径的上限.

4.8.2 宇宙方程

爱因斯坦引力场方程

膨胀的宇宙是一个富有创新性的思想. 1916 年爱因斯坦研究宇宙学时确信宇宙是静态的,为了使宇宙中的物质不会被引力吸引而聚到一起,他假定了"宇宙学"常数的存在. 它等效地导致一种物质间的相互排斥,以保证宇宙能保持静态. 经过多年的探索,终于找到了一组联系时空性质和物质分布及其运动的引力场方程:

$$R_{\mu\nu}-\frac{1}{2}g_{\mu\nu}R+\lambda g_{\mu\nu}=-\frac{8\pi G}{c^4}T_{\mu\nu},\quad \mu,\nu=1,2,3,4. \tag{4.8.16}$$

这是一个关于引力势场 $g_{\mu\nu}$的张量方程. 方程左边称为爱因斯坦张量,其中 $R_{\mu\nu}$是与空间曲率有关的张量,R 是与 $R_{\mu\nu}$有关的标量,$T_{\mu\nu}$依赖于物质分布及其运动,称为物质的能量-动量密度张量,G 是万有引力常数. 爱因斯坦原来给出的方程中有一个包含宇宙常数的宇宙项 $\lambda g_{\mu\nu}$,1922 年俄国数学家弗里德曼(A. Friedmann)指出,这个宇宙项是多余的,不必要的. 舍弃了宇宙常数后得到了宇宙膨胀及星系谱线红移的结论,这是在哈勃定律发现之前 7 年. 爱因斯坦接受了他的正确意见,爱因斯坦后来将引入宇宙常数看成自己最大的失误.

弗里德曼方程

由爱因斯坦引力场方程可以给出空间膨胀因子$R(t)$的两个方程:

$$\mathrm{d}(\rho c^2R^3)=-P\mathrm{d}(R^3), \tag{4.8.17}$$

$$\left(\frac{\dot{R}}{R}\right)^2+\frac{kc^2}{R^2}=\frac{8\pi G\rho}{3}, \tag{4.8.18}$$

其中 ρ 和 P 是宇宙物质的密度和压强在大范围内的平均值. k 是空间曲率指标. $k=0$ 是平坦开放的欧氏空间;$k=1$ 是球形封闭的黎曼(B. Riemann)空间;$k=-1$ 是双曲性开放的罗巴切夫斯基空间. 第

一个方程实际上就是热力学关系 $dU=-PdV$. 第二个方程就是弗里德曼方程,可以把它理解为宇宙中任意一点的单位质量随着宇宙膨胀的能量关系：

$$\frac{1}{2}\left(\frac{dR}{dt}\right)^2-\frac{G\rho}{R}\frac{4\pi}{3}R^3=E, \tag{4.8.19}$$

若 $E=-kc^2/2$,就是弗里德曼方程. $E<0$ 时,引力势能超过膨胀动能,宇宙膨胀到一极限后变为收缩,空间是有限的和封闭的;$E\geqslant0$ 时,膨胀动能大于引力势能,可无限地膨胀下去,空间是无限和开放的. 图 4.8.1 表示了宇宙的膨胀规律.

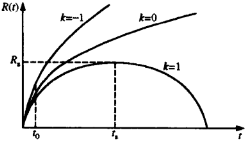


图 4.8.1 宇宙的膨胀规律

临界密度

由于

$$H=\dot{R}/R \tag{4.8.20}$$

是任意时间的哈勃常数. 则弗里德曼方程可以改写成：

$$\frac{kc^2}{H^2R^2}=\frac{\rho}{3H^2/8\pi G}-1=\frac{\rho}{\rho_c}-1, \tag{4.8.21}$$

$$\rho_c=\frac{3H^2}{8\pi G} \tag{4.8.22}$$

称为临界密度. 当 $\rho/\rho_c\leqslant1$ 时,$E\geqslant0$,膨胀动能大于引力势能,可无限地膨胀下去,空间是无限和开放的;当 $\rho/\rho_c>1$ 时,$E<0$,引力势能超过膨胀动能,宇宙膨胀到一极限后变为收缩,空间是有限的和封闭的.

4.8.3 宇宙背景辐射

消除不掉的噪声

如果把重元素看成是中古时代遗留下来的古迹的话，那么氘和氦这样的轻元素就可以说是远古时代的重要文物了. 产生这些轻元素当然是在宇宙处于高温高密度时代，可是氦也可能在恒星中由质子合成，所以研究宇宙的远古时代，最好是利用氘. 它不会在恒星中合成，而只能在其中有所消耗. 由于高温高密度时代的宇宙被假定为是各向同性的，因此氘的分布也应当是各向同性的. 对于宇宙中氘的观测，除了可以检验宇宙的各向同性外，还可以推算当时和现在宇宙的密度. 宇宙远古高温高密度时代除了氘以外，还有什么遗迹留下来可供我们研究呢？早在 1948 年伽莫夫(G. Gamow)就指出，作为大爆炸的遗留物，宇宙中应该有背景辐射，它相当于 10 K 的黑体辐射.

通讯工作者为了提高通讯的质量，长期致力于消除各种噪声的研究. 通讯电路中的噪声主要由于导电电子的无规热运动造成. 一般来说，温度越高，噪声越大. 因此噪声的大小与温度有一定的对应关系. 常用温度来标志噪声. 比如地面温度约为 300 K，它在一般射电望远镜中会造成 20～30 K 的噪声，而在喇叭形天线中，地面噪声的贡献只有 0.3 K. 1964 年美国贝尔电话实验室的彭齐亚斯(Arno Penzias)和威耳逊(Robert Wilson)为了提高卫星通讯的质量，用架设在霍姆代尔基地的卫星通讯用的喇叭形天线检查来自天空中各种噪声的原因. 这个射电望远镜在 1960 年建成，本来是用以接收卫星"回声"(echo)通讯信号的. 如果测量星体来的信号，可以将收到的信号和将望远镜对准空间没有星体处的信号相减，这样噪声就消除了. 他们对设备作了改造，将行波脉泽接收器保持在液氦温度，电路各部件的噪声温度大大降低，并作了比较精确的估计. 得到当喇叭形天线朝向天顶时的有效噪声温度是 6.7 K. 对于该温度，还应当扣除大气吸收、天线电阻损耗和地面噪声的贡献，最后得到 3.0±1.0 K 的剩余. 他们检查了天线金属板的焊缝，清扫了天线，仍然不能消除这个过剩的温度. 在此后一年的测量中，他们发现这个消除不掉的噪声是各向同性的，无偏振的，而且没有季节变化. 可以判断信号来源一定

在银河系外.

迪克的火球辐射

普林斯顿的物理学家迪克(R. H. Dicke)几乎在同时提出：当宇宙处于高温高密度状态时,当然不会有星系和恒星存在,只有粒子和辐射.他称当时的宇宙为原始火球,这火球以一次大爆炸为开始不断膨胀,物质在膨胀中逐渐冷却而凝聚为星系和星星.但是原始火球还有一种遗迹,即其中的辐射也会在膨胀中逐渐冷却,波长变长,到今天已经变成了微波,温度也只有几度了.当彭齐亚斯和威耳逊得知迪克的预言时,立刻向迪克发出了邀请,他们进行了讨论,他们终于确信,彭齐亚斯和威耳逊发现的这种消除不掉的噪声正是迪克预言的宇宙背景辐射.

彭齐亚斯和威耳逊因为发现宇宙背景辐射获得了 1978 年诺贝尔物理学奖.

4.8.4 标准大爆炸模型

有三种观测结果有力地支持宇宙大爆炸模型.宇宙的均匀膨胀、宇宙中氢和氦的相对丰度和宇宙背景辐射.宇宙从一个原始的火球爆炸开始,尺度随时间增加,温度随时间降低.宇宙中的物质成分也相应变化,进行粒子和原子核的合成,逐渐形成原子以及由原子构成的星体、星系、星系团等等.这些组成了标准大爆炸模型.[①]

宇宙膨胀开端

宇宙在 $t=0$ 的时刻从高温、高密度的奇点状态爆发演化出来,这是经典物理的概念,不符合量子物理的基本原理.根据不确定原理能量和时间是不能同时测准的.仅从这一点,还不排斥时间可以完全测准,其代价是能量完全不准.但是在引力场中,在相对论情形,还有进一步的限制,时钟速率在引力场中的不同位置是不一样的,不同的运动状态也不一样.因此,原则上不可能精确地测定时间.这个测量精度的限制可以用基本常数$\hbar$(普朗克常数)、c(光速)和 G(引力常数)组成一个时间量纲的量

---

① 陆埮,宇宙,湖南教育出版社,1999.

$$t_P = (\hbar G/c^5)^{1/2} = 5.39 \times 10^{-44}\,\text{s} \qquad (4.8.23)$$

来表示. t_P 称为普朗克时间. 相应地空间尺度的精确测量也有一个限制,这个限制就是光在普朗克时间内走过的距离

$$l_P = ct_P = (\hbar G/c^3)^{1/2} = 1.62 \times 10^{-3}\,\text{cm} \qquad (4.8.24)$$

称为普朗克尺度,相应达到的时代就称为普朗克时代. 这个时代的问题涉及到引力场的量子化,至今尚不清楚. 根据量子力学,能量与时间之间存在不确定关系 $\Delta E \Delta t \sim \hbar$. 与普朗克时间 t_P 相对应的能量不确定量为 $\hbar/t_P$,再除以 c^2 就可以得到一个相应的质量特征量,这就是普朗克质量:

$$M_P = \hbar/t_P c^2 = (\hbar c/G)^{1/2} = 2.17 \times 10^{-5}\,\text{g}. \qquad (4.8.25)$$

宇宙演化过程中的一些典型阶段

宇宙演化的早期体积很小,密度极大,温度很高. 按照现在的理论,从大爆炸开始,宇宙演化的时间 t 不可能追溯到比 10^{-44} s 更早,宇宙膨胀的尺度不可能追溯到比 10^{-35} m 更小. 从弗里德曼方程可以得到早期宇宙温度 T 和宇宙演化时间 t 之间的关系:

$$T = \frac{1.5 \times 10^{10}\,\text{s}^{12} \cdot \text{K}}{t^{12}}. \qquad (4.8.26)$$

从大爆炸开始计时[①],从 10^{-43} s 到 10^{-35} s,宇宙从 10^{28} eV 冷却到 10^{23} eV,在这样的能量范围内,强相互作用、电磁相互作用和弱相互作用合并为一个简单的相互作用,其媒介粒子为异常重的场粒子——X 玻色子. 夸克和轻子不能区分. 在 10^{-35} s 时能量为 10^{14} GeV,大统一理论时代结束,粒子能量太低不再能产生自由的 X 玻色子. 电弱相互作用与强相互作用分离,而弱相互作用 CP 不守恒,从而使核子数略多于反核子数. 在粒子物理中"核子数"定义为核子的数目减去反核子的数目,因此核子数由零变成大于零,称为"重子数起源". 核子数与反核子数微小的不平衡使得在稍后大量核子-反核子湮灭时才会有一定数量的核子保留. 但是场玻色子的衰变是不对称的,导致物质稍微比反物质多一点点,也许是多出 10^{-9}. 从此物质和

---

① Arthur Beiser, Concept of Modern Physics, 5th Ed., McGraw-Hill, Inc. New York (1995), p501.

反物质互相湮灭，使宇宙仅仅由物质组成.

由于 μ 子的质量是 106 MeV，当宇宙的温度下降到 106 MeV 以下时，正负 μ 子湮灭完了. 因为中子与质子的质量差为 1.29 MeV，当宇宙温度远大于此值时，它们通过反应 $n+e^+\leftrightarrow p+\bar{\nu}_e$ 和 $p+e^-\leftrightarrow n+\nu_e$ 保持数量相等.

从 10^{-35} s 到 10^{-10} s，宇宙由高密度的夸克轻子汤组成①. 它们的行为由强相互作用、电弱相互作用和引力相互作用决定. 在 10^{-10} s，约 10^{15} K，$kT\sim 100$ GeV 就达到了 W 和 Z 玻色子质量的范围. 根据弱电统一理论，弱相互作用和电磁相互作用是由同一个耦合常数(代表作用强度)所支配的，只是因为传递弱相互作用的规范粒子质量太高，而传递电磁相互作用的规范粒子质量为零，表观上才表现出低能量下弱相互作用的作用强度比电磁相互作用弱得多. 但是当能量远高于 W 和 Z 玻色子的质量时，这些质量可以忽略不计，弱相互作用和电磁相互作用的强度就统一了. 在约 10^{15} K 温度，弱作用明显弱于电磁作用. 粒子能量已经不够产生自由的电弱相互作用 W 和 Z 玻色子，它们像早期统一相互作用 X 玻色子一样消失了. 在温度 10^{15} K 到 10^{28} K 之间，从现在的粒子物理来看，没有新的物理现象，因此，人们常称这个时期为大沙漠.

在温度 10^{14} K($k_BT=8.6$ GeV)时，宇宙物质成分有光子、正负电子、正负 μ 子、中微子及反中微子、质子与反质子、中子与反中子和介子. 各种粒子通过相互转换保持平衡：

$$\left.\begin{array}{ll}\gamma+\gamma\leftrightarrow e^++e^-, & \mu^++\mu^-\leftrightarrow p+\bar{p},\\ \bar{\nu}_e+p\leftrightarrow e^++n, & \nu_e+n\leftrightarrow e^-+p,\\ \nu_e+\bar{p}\leftrightarrow e^-+\bar{n}, & \bar{\nu}_e+\bar{n}\leftrightarrow e^++\bar{p}.\end{array}\right\} \tag{4.8.27}$$

在温度 10^{14} K($k_BT=8.6$ GeV)下，以上各种粒子都是相对论性的. 对任何一种处于相对论性的粒子，其粒子数密度为

$$n=\tilde{g}\frac{\zeta(3)}{\pi^2}\frac{k^3}{\hbar^3c^3}T^3, \tag{4.8.28}$$

① Steven Weinberg, The first three minutes, Basic Books, New York(1988); 中译本，张承泉，最初三分钟，中国对外翻译出版公司，2000.

其能量密度为

$$\rho = \widetilde{g}\,\frac{\pi^2 k^4}{30\hbar^3 c^3}T^4, \tag{4.8.29}$$

其中 $\zeta(3)=1.202$，$\widetilde{g}$ 是等效自由度数：对光子 $\widetilde{g}=2$，相当于两种极化状态；对正负电子或正反核子 $\widetilde{g}=4\times7/8$，因子 4 来自两种极化状态和正反两种粒子，7/8 是量子统计给予费米子的因子；对一种中微子 $\widetilde{g}=2\times7/8$，由于正反中微子各只对应一种极化状态，因此各有一个自由度而不是两个.

$T=3\times10^{11}$ K（$k_BT=8.6$ MeV）也是一个区分的温度. 在此之前，当 k_BT 小于几百个 MeV 时，多数光子的能量已经小于 1 GeV，$p+\bar{p}\to\gamma+\gamma$ 和 $n+\bar{n}\to\gamma+\gamma$ 已经成为单向的了. 此时发生大量核子-反核子湮灭，其最终产物是光子、正负电子及中微子.

在 10^{-6} s 前后夸克凝聚成强子. 当温度下降到 10^{11} K 时，相当于 10 MeV 的能量，在已知粒子中，光子、中微子和电子，以及它们的反粒子都处于同一温度的热平衡状态中. 强子的成分很少，主要是轻子，宇宙演化的这一阶段称为轻子时代.

$T=3\times10^{10}$ K（$k_BT=2.58$ MeV）时，中子与质子仍然可以通过以上反应相互转变，但是中子与质子的质量差为 1.29 MeV，与 $k_BT=2.58$ MeV 已经同数量级，中子数与质子数之比由玻尔兹曼统计决定：

$$\frac{N_n}{N_p} = \exp(-\Delta m/k_BT), \tag{4.8.30}$$

此时 $N_n/N_p=0.61$. 当宇宙温度下降到 10^{10} K（$k_BT=0.86$ MeV）时 $N_n/N_p=0.22$.

在 10^{10} K 以前，中微子和别的粒子处在相同温度的平衡状态中，但是在 10^{10} K，大约为 1 s 以后，中微子不再参与碰撞而保持在 10^{10} K 时的状态上自由地运动. 10^{10} K 便是中微子脱离热耦合而获得自由的温度，简称中微子脱耦温度. 中微子和反中微子保存在宇宙中，不再参加以后宇宙演化过程. 从此质子不再通过逆转的 β 衰变转变为中子，但是自由中子能 β 衰变成质子.

失去中微子这个平衡媒介，中子数与质子数之比不再由玻尔兹

曼统计决定．从 $N_n/N_p=0.22$ 开始，中子数与质子数之比取决于自由中子衰变：$n\rightarrow p+e^-+\bar{\nu}_e$．在此以前不必考虑中子衰变，中微子退耦合之初，它的温度与光子温度相同，但以后单独发展就会产生差别．

$T=5\times10^9$ K($k_BT=0.5$ MeV)时，由于电子质量为 0.51 MeV，因此从此时开始 $e^++e^-\leftrightarrow\gamma+\gamma$ 反应从左向右的几率越来越大，$N_n/N_p=0.20$，中子和质子明显地合成了氘核．氘核和氘核碰撞就十分有效地生成氦核，由于氦核中的中子不再衰变，中子得救了，这个过程为我们的物质世界保存了大量中子．

当宇宙演化到 $T=10^9$ K($k_BT=86.2$ keV)时，中子衰变结果使 $N_n/N_p=0.12$，此时氘核合成大量进行．合成完成后，质子占重子质量的 78%，氘核占 22%．质子与氘核的数量比取决于合成大量进行时的中子与质子数量比．这个时间依赖一个重要参数，即核子与光子的数量比 $\eta=n_N/n_\gamma$．原因是足够数量的能量大于 2.2 MeV 的光子妨碍氘核合成．$T=3\times10^8$ K($k_BT=26$ keV)时，全部正电子湮灭．核反应开始出现，使得很多质子在衰变前就合并产生氦核．在 5 分钟左右合成停止，根据理论计算此时质子数和 α 粒子数之比约为 3：1，这个比值就是今天我们在几乎全部宇宙中发现的比值．有些 ^{2}H 和 ^{3}He 核留下了，不过只有很少的一小部分．

从大爆炸后 3 分钟($T=10^9$ K)到 4×10^5 年($T=4000$ K)，宇宙由氢、氦核和电子等离子体与辐射处于热平衡．一旦温度低于氢原子的电离能 13.6 eV，氢原子可以不再分裂．由于高于 4000 K 时只占光子中极少数的 13.6 eV 以上的高能光子为数仍然不少，足以使氢原子分裂而积累不起来，因而只有当温度降到 4000 K 以下时，氢原子才得以有效积累起来，复合过程才能有效地进行．4000 K 以后，光子就脱离热平衡而变成自由气体，与中微子一样，加入到脱离热平衡的大量成分的行列中去．物质和辐射退耦合，宇宙变得透明．电磁相互作用被逐出，就像前期强相互作用和弱相互作用一样．光子能量太小，不再物质化为粒子和反粒子对，在中性原子的宇宙中，韧致辐射不再能由加速离子产生．留下来的辐射散布在整个宇宙，由于多普勒红移而使波长越来越长．虽然这时光子已不再处于热平衡态，却仍然

保持着与热平衡一样的黑体辐射谱;虽然已经没有热平衡的温度含义,却仍然可以用与热平衡温度相等的等效温度概念来描写它,而且随着宇宙膨胀等效温度也同样地下降. 4000 K 的黑体辐射下降到 2.7 K的黑体辐射. 今天的观测者可以得到这个剩余的辐射各向同性,具有类似 2.7 K 黑体的辐射谱. 一旦物质和辐射退耦,引力变成了宇宙演化的主要影响力. 密度涨落导致星系和星体的形成并装饰这黑暗的天空. 早期的超新星喷发出各种重于氦的元素. 表 4.8.1 表示了宇宙演化的情况.

表 4.8.1 宇宙演化时间表

T/K	E/eV	t	时代	物理过程
10^{32}	10^{28}	10^{-44} s	普朗克时代	粒子产生
10^{28}	10^{24}	10^{-36} s	大统一时代 “大沙漠”	重子不对称性产生
10^{13}	10^{9}	10^{-6} s	强子时代	大量强子过程
10^{11}	10^{7}	10^{-2} s	轻子时代	轻子过程
10^{10}	10^{6}	1 s		中微子脱耦,n_n/n_p 比值冻结
5×10^{9}	5×10^{5}	5 s		e^+e^- 湮灭,中子自由衰变
10^{9}	10^{5}	3 min	核合成时代	^{4}He 等生成
4×10^{3}	0.4	4×10^{5} a	复合时代	中性原子生成、光子脱耦, 星系形成、太阳系形成
2.7	3×10^{4}	$\sim10^{10}$ a	现在	人类进行科学实验

宇宙暴胀理论

暴胀宇宙学说是 1979～1981 年间古思(A. Guth)、温伯格和威尔茨克(F. Wilczek)三人首先提出来的. 按照这个学说,在大爆炸后不到 10^{-35} 秒的瞬间,宇宙以惊人的指数率膨胀,故称为暴胀(inflation). 暴胀持续了约 10^{-32}秒以上,但是在此非常短的时刻,宇宙的体积却增大了 10^{43}倍! 一个比质子还小的区域,一下子变成直径 10 cm 的球体. 到暴胀阶段终结时,大能量的亚原子粒子开始在空间出现,宇宙恢复了正常的膨胀,直至今天.

宇宙在大统一时代经历过一次从对称到破缺的真空相变. 这个概念首先是从粒子物理中提出来的. 粒子物理中有一种早已在理论

上提出，而实验上至今尚未发现的粒子，即希格斯(Higgs)粒子，用 φ 表示希格斯粒子所对应的标量场. 说明这种机制的简单例子是令 φ 场的自作用势能密度为[①]：

$$V(\varphi) = -m\varphi^2 + \lambda\varphi^4 \tag{4.8.31}$$

在场论中，人们把能量最低的态叫做真空. 这种自作用的特点是 φ 场具有反号对称，可是它的真空态不在 $\varphi=0$，而在 $\varphi=\varphi_0$ 和 $\varphi=-\varphi_0$. 设 $\varphi=0$ 态的能量比真空态的能量高 E_0，则不管实际真空态在 φ_0 或 $-\varphi_0$，只要场的能量低于 E_0，场的状态就失去了 φ 的反号对称性. 这就是低能现象的对称性自发破缺. 若场的能量高于 E_0，场的状态将恢复失去的对称，这种机制早先由希格斯提出，因此相应的标量场 φ 也称为希格斯场.

宇宙学处理的是非零温度下的统计系统. 当系统的温度为 T，希格斯场的真空由它的自由能密度 $F(\varphi,T)$ 取极小来标志. 用量子统计方法，可由 $V(\varphi)$ 算出 $F(\varphi,T)$. 宇宙早期存在一个临界温度 T_c，约为 10^{15} GeV($\sim 10^{28}$ K). 当 $T>T_c$ 时，标量场(希格斯场)自由能密度 $F(\varphi,T)$ 只有一个在 $\varphi=0$ 的极小值，如图 4.8.2 所示. 即只有一个"真"真空态. 这是一个保持原有对称的状态. 当温度降至 $T=T_c$，$\varphi=0$ 和 $\varphi=\pm\varphi_0$ 对应于同一自由能密度 $F(\varphi,T)$ 的极小值，对称破缺的真空态出现了，但是它与对称真空的能量是简并的. 这正是真空的相变条件. 从 $\varphi=0$ 的真空相向比如 $\varphi=\varphi_0$ 的真空相转变，这是真空从对称态向破缺态的相变. 但是，从 $\varphi=0$ 的真空相向 $\varphi=\varphi_0$ 的真空相转变其间要穿过一个势垒.

当 $T<T_c$ 时，$\varphi=\varphi_0$ 的真空相的自由能密度 $F(\varphi,T)$ 比 $\varphi=0$ 相更低，$\varphi=0$ 态虽仍然是局部极小值，但它不再是最小的极小. 因此 $\varphi=0$ 相成了亚稳的假真空相，他们会自发地向 $\varphi=\varphi_0$ 相转变，仍然要穿过一个势垒. 这种转变就是 φ 场的真空相变. 当宇宙温度远高于 T_c 时，气体的能量密度远大于真空能密度，真空能的影响可以忽略. 宇宙大爆炸的标准模型完全适用. 新的情况开始发生在温度接近 T_c 时，由于势垒的阻隔，真空相变并不能在 $T=T_c$ 后立即发生，宇宙温

---

① 余允强，广义相对论引论，北京大学出版社，1997.

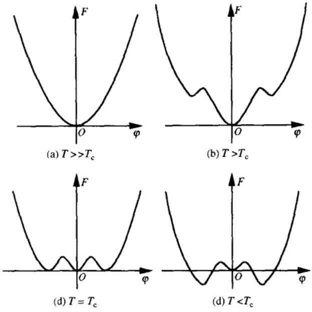


图 4.8.2　随温度的变化

度因膨胀而降至 T_c 以下，而真空却仍滞留于 $\varphi=0$ 态，即宇宙处于相变前的过冷态，在过冷态下，气体的热动能密度已变得小于真空能密度，即宇宙出现了真空为主的状态，这是原来标准模型所没有考虑过的情形. 注意到真空能密度是常数，宇宙早期的动力学方程的解变为：$R(t)\propto e^{Ht}$，其中 $H\approx10^{34}\ s^{-1}$是当时的哈勃常数值. 这个结果表明，在完成相变前，宇宙会发生非常激烈的加速膨胀，通常称为暴胀. 最终总会在温度远低于 T_c 的某个时刻，真空完成了从对称相向对称破缺相的过渡. 这两个相之间的能量差将作为相变潜热放出，使气体的温度回升至接近 T_c. 这样真空相变就结束了. 相变结束后，由于破缺真空态的能密度已很低，它重新可被忽略不计. 这样，宇宙又恢复了按标准模型的正常膨胀.

标准宇宙模型存在奇点疑难，平直性疑难，域壁疑难，磁单极子疑难等一系列困难. 似乎说在大爆炸发生以前，宇宙是不存在的，但是我们可以认为上述幽灵般的场便是宇宙前身的形式，从而避开了奇点疑难；其次，新学说中的宇宙要比旧模型中的宇宙大得多，因而看上去也平坦得多，就像地球表面的一只蚂蚁认为地球是平的，而不

是球形的道理一样；第三，在暴胀宇宙模型中，膨胀很快，使具有相互联系的范围迅速变大，即视界迅速变大，从而解决了均匀性疑难；第四，大统一理论认为磁单极子是在对称相转变为非对称相（犹如水变为冰）的过程中产生的，所产生的磁单极子数量与相转变的速度成比例. 在标准模型中，相转变非常之快，以致磁单极子大量出现，而在暴胀模型中，相转变比较缓慢，因而磁单极子也较少.

例题 4.8.1　试用哈勃定律估算从远处的星系发射来的钠黄光 5890 Å 谱线的波长，若星系到我们的距离分别为 1.0×10^6 光年，1.0×10^8 光年，1.0×10^{10} 光年.

解　$\lambda=\lambda_0\left(1+\dfrac{H_0 d}{c}\right)$，

1 光年 $=9.461\times10^{15}$ m，1 Mpc $=3.084\times10^{19}$ m，

若星系到我们的距离为 1.0×10^6 光年时：$\lambda_1=5893$ Å，

若星系到我们的距离为 1.0×10^8 光年时：$\lambda_2=6221$ Å，

若星系到我们的距离为 1.0×10^{10} 光年时：$\lambda_3=39013$ Å.

例题 4.8.2　光子产生核子和反核子对，光子的能量至少必须是光子的静质能 mc^2. (1) 求在什么温度下宇宙足够热得可以由光子产生出核子对. (2) 宇宙在什么年代有这么高温度？

解

(1) $T=\dfrac{mc^2}{k_B}=\dfrac{940\ \text{MeV}}{8.62\times10^{-5}\ \text{eV/K}}=1.1\times10^{13}\ \text{K}.$

(2) $t=\left(\dfrac{1.5\times10^{10}\ \text{s}^{1/2}\cdot\text{K}}{T}\right)^2=2\times10^{-6}\ \text{s}.$

例题 4.8.3　何时宇宙太冷，不能使辐射产生 μ^+ 和 μ^- 对？

解　μ 子的静质能为 105.7 MeV. 光子具有这样的能量时的温度为

$$T=\frac{E}{k_B}=\frac{105.7\ \text{MeV}}{8.62\times10^{-5}\ \text{eV/K}}=1.23\times10^{12}\ \text{K}.$$

相应的时间为

$$t=\left(\frac{1.5\times10^{10}\ \text{s}^{1/2}\cdot\text{K}}{T}\right)^2=1.5\times10^{-4}\ \text{s}.$$

例题 4.8.4　哈勃常数可能低到 50 km/(s · Mpc)，也可能高到 100 km/(s · Mpc)，试对这两个值分别计算使宇宙封闭所必需的临

界密度.

解 $\rho_c=\frac{3H^2}{8\pi G}$，$G=6.67259\times10^{12}\ cm^3\cdot g^{-1}\cdot s^{-2}$，

当 $H=50\ km/(s\cdot Mpc)$时，$\rho_c=4.69\times10^{-27}\ kg/m^3$.

当 $H=100\ km/(s\cdot Mpc)$时，$\rho_c=1.87\times10^{-26}\ kg/m^3$.

习　题

4.8.1 从距离为 2.4×10^8 pc 的银河系发射的氢原子的波长为 656.3 nm H_α 线，我们观测到此光线的波长是多少？

4.8.2 实验室中钠的一根谱线的波长为 590.0 nm. 从某一特殊的银河系观测到此光线的波长为 602.0 nm，假定哈勃定律成立，计算此银河系的距离.

4.8.3 (1) 光子产生 π^+-π^- 对所需的宇宙的最低温度是多少？(2) 在什么年龄宇宙具有这样的温度？

物理学常数

物理量	符号	数　值	单　位
真空中光速	c	$2.997\,924\,58\times10^{8}$	$m\cdot s^{-1}$
真空磁导率	μ_0	$4\pi\times10^{-7}$	$N\cdot A^{-2}$
真空介电常数	ε_0	$8.854\,187\,817\times10^{-12}$	$C^2\cdot N^{-1}\cdot m^{-2}$
普朗克常数	h	$6.626\,075\,5(40)\times10^{-34}$	$J\cdot s$
	$h/2\pi$	$1.054\,572\,66(63)\times10^{-34}$	$J\cdot s$
玻尔兹曼常数	k_B	$1.380\,658(12)\times10^{-23}$	$J\cdot K^{-1}$
阿伏伽德罗常数	N_A	$6.022\,136\,7(36)\times10^{23}$	mol^{-1}
斯特藩常数	σ	$5.670\,51(19)\times10^{-8}$	$J\cdot s^{-1}\cdot m^{-2}\cdot K^{-4}$
精细结构常数	α	$7.297\,353\,08(33)\times10^{-3}$	
里德伯能量	R'_∞	$13.605\,698\,1(42)$	eV
里德伯常数	R_∞	$1.097\,373\,1\times10^{5}$	cm^{-1}
摩尔体积	V_m	$22.412\,10(19)$	$1\cdot mol^{-1}$
电子电荷	e	$1.602\,177\,33(4)\times10^{-19}$	C
电子质量	m_e	$0.510\,999\,06(15)$	MeV
		$9.109\,389\,7(54)\times10^{-31}$	kg
玻尔半径	a_1	$0.529\,177\,249(24)\times10^{-10}$	m
玻尔磁子	μ_B	$5.788\,382\,63(52)\times10^{-5}$	$eV\cdot T^{-1}$
核磁子	μ_N	$3.152\,451\,66(28)\times10^{-8}$	$eV\cdot T^{-1}$
质子质量	m_p	$938.272\,31(28)$	MeV
		$1.007\,276\,470(12)$	u
原子质量单位	u	$1.660\,540\,2\times10^{-27}$	kg
中子质量	m_n	$939.565\,63(28)$	MeV
		$1.008\,665$	u
万有引力常数	G	$6.672\,59(85)\times10^{-8}$	$cm^3\cdot g^{-1}\cdot s^{-2}$
太阳年	a	365.256	d
		$3.155\,8\times10^{7}$	s
电子伏[特]	eV	$1.602\,177\,33(49)\times10^{-19}$	J
		$11\,604.45(10)$	K